

1 INTRODUCERE

Pentru un sistem cuantic o funcție de corelație înglobează informații privind starea sistemului, de fapt, cunoașterea tuturor funcțiilor de corelație determină complet starea sa, de unde și importanța lor deosebită. Acest lucru este adevărat atât pentru stări de echilibru cât și pentru stări de neechilibru staționare sau variabile în timp. Stările de echilibru fac obiectul mecanicii statistice de echilibru și acest domeniu a cunoscut o dezvoltare masivă începând cu a doua jumătate a secolului trecut, obținându-se numeroase rezultate privind atât descrierea fenomenelor fizice (suprafluiditate, supraconductibilitate, etc), cât și fundamentarea riguroasă a domeniului. Studiile privind stările de neechilibru au avut de asemenea o dezvoltare importantă, obținându-se rezultate semnificative pentru apropierea sistemelor de echilibru (ecuație Boltzmann clasică și cuantică) și pentru sisteme aflate în stări staționare aproape de echilibru (răspuns liniar, formulă Kubo, relații Onsager). Totuși mecanica statistică de neechilibru se află într-o situație mai dificilă: pe de o parte metodele tradiționale (ecuație Boltzmann, răspuns linear, etc.) nu pot da seama de multe situații fizice de interes, în special cazul sistemelor aflate departe de echilibru, iar pe de altă parte există obiecții de principiu, spre exemplu, ecuația Boltzmann clasică, pentru care există numeroase rezultate matematic riguroase, nu se integrează formal în mecanica statistică, ea nefiind o consecință a mecanicii hamiltoniene.

În ultimii ani s-au făcut studii fructuoase asupra stărilor staționare de neechilibru (nonequilibrium steady states NESS) pentru sisteme finite, atât clasice cât și cuantice. În cazul clasic folosind conceptul de termostat gaussian s-au obținut rezultate riguroase, printre cele mai semnificative sunt: teorema de fluctuație-disipație datorată lui Gallavotti și Cohen [1], o formulă generală pentru răspunsul liniar Ruelle [2] sau regula de “pairing” datorată lui Dettmann și Morriss [3], pentru o trecere în revistă se poate consulta [4], [5]. Această abordare este nehamiltoniană deoarece sistemul finit \mathcal{S} este ținut departe de echilibru de forțe nehamiltoniene și este în “contact” cu termostatul gaussian care preia excesul de energie tot prin forțe neconservative. Spre deosebire de cazul clasic, în cazul cuantic este posibilă o abordare hamiltoniană completă și s-au obținut rezultate semnificative pentru următoarea situație generică: un sistem finit \mathcal{S} pus în contact cu două (sau mai multe) rezervoare infinite (termostate) \mathcal{R}_1 și \mathcal{R}_2 aflate în stări diferite (temperaturi diferite, potențiale chimice diferite, etc.), urmărindu-se evoluția stării sistemului total $\mathcal{R}_1 \cup \mathcal{S} \cup \mathcal{R}_2$ pentru $t \rightarrow \infty$, adică instalarea NESS, în caz

că limita există. Această abordare este posibilă deoarece în mecanica statistică cuantică stările de echilibru și dinamica sistemului sunt legate intrinsec prin condiția KMS și pentru anumite sisteme (spini în interacție, fermioni sau bosoni liberi) există și în limita termodinamică o dinamică hamiltoniană determinată în esență de starea de echilibru. Astfel de sisteme infinite ce țin sistemul finit \mathcal{S} departe de echilibru pot fi descrise convenabil numai în formalismul standard algebric [6, 7].

Sistemul $\mathcal{R}_1 \cup \mathcal{S} \cup \mathcal{R}_2$ este descris de C^* -algebra observabilelor

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}_1 \otimes \mathcal{O}_{\mathcal{S}} \otimes \mathcal{O}_2 \quad (1.1)$$

produs direct al C^* -algebrelor rezervoarelor și sistemului \mathcal{S} , starea sa este determinată de o funcțională pozitivă și normată ω pe algebra observabilelor \mathcal{O} , iar evoluția este dată de un grup de $*$ -automorfisme al C^* -algebrei observabilelor. Inițial, cât timp nu avem interacțiuni între rezervoare și \mathcal{S} , dinamica necuplată este dată de grupul de $*$ -automorfisme

$$\alpha^t = \alpha_1^t \otimes \alpha_{\mathcal{S}}^t \otimes \alpha_2^t, \quad (1.2)$$

produs direct al evoluțiilor separate ale rezervoarelor și a probei \mathcal{S} , iar starea sistemului este

$$\omega^0 = \omega_1^0 \otimes \omega_{\mathcal{S}}^0 \otimes \omega_2^0, \quad (1.3)$$

unde $\omega_{1,2}^0$ sunt stări de echilibru ale celor două rezervoare, iar $\omega_{\mathcal{S}}^0$ este $\alpha_{\mathcal{S}}^t$ -invariantă, astfel ω^0 este α^t -invariantă: $\omega^0(\alpha^t(A)) = \omega^0(A)$ pentru $t \in \mathbb{R}$ și $A \in \mathcal{O}$. La $t = 0$ este introdus un cuplaj între rezervoare și proba \mathcal{S} astfel că pentru timpi pozitivi, evoluția sistemului este guvernată de un alt grup de $*$ -automorfisme al C^* -algebrei τ^t . De regulă, τ^t se construiește ca o perturbație locală a lui α^t , cu ajutorul unei serii Dyson tare-convergentă. Starea inițială ω^0 va evolua conform cu noua dinamică, adică media unei observabile $A \in \mathcal{O}$ la momentul t va fi

$$\omega^t(A) = \omega^0(\tau^t(A)) = \omega^0(\alpha^{-t} \cdot \tau^t(A)), \quad (1.4)$$

dată fiind α^t -invarianța stării inițiale ω^0 . Existența unei stări staționare (τ^t -invariantă) când $t \rightarrow \infty$ este asigurată dacă, de exemplu, pentru orice $A \in \mathcal{O}$ există limita

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha^{-t} \cdot \tau^t(A) = \Omega^+(A), \quad (1.5)$$

altfel spus, dacă există endomorfismul Möller corespunzător perechii (α^t, τ^t) .

In acest context s-au obținut o serie de rezultate semnificative privind existența NESS, curenții de energie și particule, producția de entropie, relații Onsager, formulă Green-Kubo, etc . Pentru rezervoare de fermioni liberi cu tunelare directă multiparticulă (fără proba \mathcal{S}) vezi Fröhlich și alții [8], același tip de rezervoare cuplate cu o interacție uniparticulă la un sistem finit \mathcal{S} este considerat de Aschbacher și alții [9], pentru o privire de ansamblu vezi [10] și referințele. Fenomenul de condensare Bose-Einstein face ca tratarea rezervoarelor de bosoni să fie mai dificilă. Cazul unui singur rezervor de bosoni liberi în contact cu un sistem cuantic cu un număr finit de stări, i.e. revenirea la echilibru, este abordat de Merkli [11], cazul a două rezervoare cuplate prin tunelare directă este tratat de Angelescu și Bundaru [12]. Rezervoare de bosoni sau fermioni liberi cuplate cu un sistem cuantic finit au fost studiate de Merkli și alții [13] și Angelescu și alții [14].

In lucrarea de față se studiază un model simplu: rezervoarele $\mathcal{R}_{1,2}$ sunt formate din electroni liberi pe rețele infinite (aproximația electronilor strâns legați) și sistemul finit \mathcal{S} este un lanț din n atomi, fir cuantic, cu aceeași aproximație pentru electroni. Cuplajul se face prin tunelare uniparticulă între rezervoare și extremitățile lui \mathcal{S} .

Scopul este, ca în cadrul unui model foarte simplu să se pună în evidență modificarea funcțiilor de corelație datorată, pe de o parte condițiilor geometrice impuse sistemului, iar pe de altă parte faptului că starea sa este staționară, dar de neechilibru. Cum stările sistemului sunt cuasilibere vom avea numai corelații impuse de statistică, în cazul nostru, fermi. Astfel modificarea funcțiilor de corelație se datorează numai geometriei și faptului că sistemul se află într-o stare staționară de neechilibru. Simplitatea modelului permite exprimarea mărimilor de interes cum ar fi densitățile de particule sau energie pe nod, într-o formă ce se pretează la calcule numerice. Calculul distribuției acestor mărimi în lungul firului cuantic ne poate arăta în ce măsură se poate vorbi de o temperatură locală, problemă de un evident interes teoretic.

In capitolul doi al tezei se prezintă o introducere minimală a formalismului algebric, formalism capabil să descrie coerent sisteme infinite, numai astfel de sisteme având proprietăți disipative absolut necesare pentru atingerea staționarității la neechilibru.

Se prezintă pe scurt euristica metodei algebrice, modul în care noțiunea de stare pe C^* -algebre generalizează noțiunea obișnuită de stare, păstrând totodată intactă rețeta standard a mecanicii cuantice. Se dezvoltă pe scurt teoria spațiilor Fock, a operatorilor de creare și anihilare pentru bosoni și

fermioni, precum și a relațiilor canonice de comutare (CCR) și anticomutare (CAR) satisfăcute de aceștia. Se consideră algebra CAR generată de operatorii de creare și anihilare fermionici pe spațiul Fock și se dă caracterizarea sa ca C^* -algebră abstractă dependentă numai de spațiul hilbert uniparticulă \mathcal{H} . Se definesc stările cuasilibere pe $CAR(\mathcal{H})$ și se exprimă în funcție de matricele densitate asociate și, în sfârșit, se consideră evoluția lor determinată de hamiltonieni în spațiul uniparticulă \mathcal{H} . Pentru a facilita parcurgerea acestui capitol, s-au colectat într-o anexă noțiunile fundamentale privitoare la C^* -algebre și stări.

Capitolul trei se ocupă cu descrierea modelului, cu caracterizarea spectrală a hamiltonienilor sistemului necuplat și în mod deosebit de analiza spectrală a hamiltonianului sistemului cuplat. Se obține o formă simplă a rezolventei sale, formă ce permite exprimarea funcțiilor proprii generalizate într-o formă calculabilă numeric.

În esență, folosind o variantă a metodei Feshbach, se exprimă rezolventa sistemului cuplat în funcție de rezolventele rezervoarelor libere și rezolventa unui hamiltonian efectiv. Hamiltonianul efectiv este hamiltonianul sistemului finit \mathcal{S} perturbat cu partea imaginară a rezolventelor libere ale rezervoarelor înmulțită cu t^2 (t este mărimea tunelării între rezervoare și probă). Ca urmare hamiltonianul efectiv este finit dimensional și rezolventa sa se poate caracteriza calitativ. Principalul rezultat este că valorile proprii ale hamiltonianului liber al probei \mathcal{S} care cad în spectrul continuu al rezervoarelor dispar și devin rezonanțe, mărimea și dispunerea acestora controlează funcțiile proprii generalizate ale sistemului cuplat și prin urmare determină și proprietățile stării staționare de neechilibru ce se instalează în sistem. Totodată faptul că hamiltonianul efectiv este finit dimensional permite efectuarea calculelor numerice cu ușurință. Această problemă este analizată pe scurt în [15], o analiză mai detaliată este cuprinsă în [14].

În capitolul patru se construiește starea staționară de neechilibru. Matricea densitate ce determină NESS se exprimă prin intermediul operatorilor Möller. Se calculează funcțiile proprii generalizate, și prin intermediul lor se găsește forma operatorilor Möller și se exprimă și matricea densitate a NESS, formulă ce permite exprimarea observabilelor locale. Se analizează cazul a două rezervoare unidimensionale cuplate printr-un fir cuantic și sunt prezentate rezultate numerice pentru acest caz. Se vede clar cum structura de rezonanțe a rezolventei hamiltonianului efectiv se reflectă în amplitudinea funcțiilor proprii generalizate și ca urmare determină structura de salturi a densității pe nod ca funcție de temperatură sau ca funcție de densitățile rez-

ervoarelor în stările de echilibru inițiale. Acest fenomen este analog și are aceeași cauză ca efectul de platouri a curentului în funcție de potențialul chimic descris pentru același model în [16]. Din rezultatele numerice rezultă că densitatea pe nodurile probei \mathcal{S} este practic constantă și nu prezintă un profil care să interpoleze lin între densitățile rezervoarelor.

În ultimul capitol se analizează un sistem de spini clasici supuși de această dată unei constrîngerii geometrice asupra razei interacției dintre spini: dacă sistemul este compus din n spini, se presupune că oricare pereche de spini (x_i, x_j) are un cuplaj pozitiv proporțional cu $1/n$, i.e. se presupune o interacțiune feromagnetică de câmp mediu. Această formă a interacției șterge orice influență a formei sistemului, lăsînd să se manifeste exclusiv interacția care, în limita termodinamică, are raza infinită dar este infinit de slabă. La n finit se consideră funcția de distribuție a observabilei globale $\sum_i x_i$, (media magnetizării sistemului) pentru care se găsește o relație de recurență ce exprimă valoarea sa pentru sistemul cu $n + 1$ spini în funcție de valoarea pentru sistemul cu n spini. În limita termodinamică, pentru această funcție de distribuție se obține o ecuație diferențială, a cărei rezolvare dă atît magnetizarea sistemului cît și energia sa liberă, putîndu-se astfel analiza tranziția de fază feromagnetică. Pentru cazul cu simetrie la rotații ecuația se rezolvă explicit, în celelalte cazuri problema poate fi abordată numeric.

2 ABORDAREA ALGEBRICĂ

2.1 Punerea problemei

În mod obișnuit, un sistem cuantic este descris prin precizarea spațiului hilbert \mathcal{H} asociat sistemului și a operatorului autoadjunct H , hamiltonianul sistemului, care guvernează dinamica sa. Observabilele sistemului sunt operatorii mărginiți $B(\mathcal{H})$ din \mathcal{H} , iar stările sale pure sunt vectorii de normă unu din \mathcal{H} . Astfel că atunci când sistemul se află în starea $\psi \in \mathcal{H}$, valoarea expectată a observabilei este

$$\langle A \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle. \quad (2.1)$$

Evoluția unei stări pure ψ se face conform ecuației Schrödinger

$$i\partial_t\psi = H\psi, \quad \psi \in \mathcal{H}, \quad (2.2)$$

ca urmare la momentul t starea sistemului și valoarea expectată a unei observabile A vor fi respectiv

$$\psi_t = e^{-iHt}\psi_0 \quad \text{și} \quad \langle A \rangle^t = \langle \psi_t, A\psi_t \rangle = \langle \psi_0, e^{iHt} A e^{-iHt} \psi_0 \rangle. \quad (2.3)$$

Relațiile de mai sus evidențiază cele două posibilități echivalente de interpretare. Reprezentarea Schrödinger, în care stările evoluează conform ecuației $\psi_t = e^{-iHt}\psi_0$, observabilele nu depind de timp, iar valorile lor expectate la momentul t sunt $\langle A \rangle^t = \langle \psi_t, A\psi_t \rangle$. Respectiv reprezentarea Heisenberg, în care stările nu depind de timp, observabilele evoluează conform cu ecuația $A^t = e^{iHt} A e^{-iHt}$, iar valorile lor expectate sunt $\langle A \rangle^t = \langle \psi_0, A^t \psi_0 \rangle$.

Descrierea unui sistem cuantic prin stări pure nu este suficientă. În cele mai multe cazuri (de exemplu în cazul echilibrului termodinamic) un sistem se află cu anumite probabilități $p_n \geq 0$ în diferite stări pure ψ_n , altfel spus media unei observabile este

$$\langle A \rangle = \sum_n p_n \langle \psi_n, A\psi_n \rangle, \quad (2.4)$$

unde desigur este presupus că $\sum_n p_n = 1$ și că $\{\psi_n\}$ formează un sistem ortonormat complet în \mathcal{H} . Dacă se consideră observabilele $P_n(\cdot) = \psi_n \langle \psi_n, \cdot \rangle$, i.e. proiectorii ortogonali pe stările ψ_n , relația (2.4) se poate pune sub forma

$$\langle A \rangle = \text{tr} \rho A, \quad \text{unde } \rho = \sum_n p_n P_n. \quad (2.5)$$

Astfel prin *stare* se înțelege un operator $\rho \in B(\mathcal{H})$ pozitiv și de urmă unu adică: $\langle \psi, \rho \psi \rangle \geq 0$ oricare ar fi $\psi \in \mathcal{H}$ și $\text{tr} \rho = 1$, un astfel de operator se mai numește *matrice densitate*. Stările pure se regăsesc când $\rho^2 = \rho$, ceea ce este echivalent cu faptul că un singur coeficient p_n este diferit de 0 în expresia (2.5) a lui ρ . În ce privește evoluția, avînd în vedere că în ecuația (2.5) $P_{n,t}(\cdot) = \psi_{n,t} \langle \psi_{n,t}, \cdot \rangle = e^{-iHt} \psi_{n,0} \langle e^{-iHt} \psi_{n,0}, \cdot \rangle$, obținem

$$\rho_t = e^{-iHt} \rho_0 e^{iHt} \quad \text{și} \quad \langle A \rangle^t = \text{tr} \rho_t A = \text{tr} \rho_0 e^{iHt} A e^{-iHt} = \text{tr} \rho_0 A^t, \quad (2.6)$$

relații ce înlocuiesc ecuațiile (2.3) din cazul stărilor pure.

Această generalizare a noțiunii de stare nu este totuși suficientă pentru a descrie sisteme cuantice cu un număr infinit de grade de libertate, cum ar fi sistemele în limită termodinamică sau cîmpurile cuantice. Să remarcăm că mulțimea observabilelor $B(\mathcal{H})$ formează o C^* -algebră (vezi anexa A) iar evoluția lor este dată de grupul de $*$ -automorfisme $\tau^t(\cdot) = e^{iHt}(\cdot)e^{-iHt}$ al C^* -algebrei $B(\mathcal{H})$. Pe de altă parte aplicația $A \rightarrow \text{tr} \rho A$ determinată de matricea densitate ρ este o funcțională liniară, pozitivă și de normă 1 pe $B(\mathcal{H})$ (este pozitivă deoarece $\text{tr} \rho A^* A = \text{tr} \rho^{1/2} A^* A \rho^{1/2} = \text{tr} (A \rho^{1/2})^* A \rho^{1/2} \geq 0$ și are norma 1 deoarece $\text{tr} \rho I = 1$). Reciproc, dacă ω este o funcțională liniară continuă pe $B(\mathcal{H})$, atunci [6, propoziția 2.4.3] există un operator $\rho \in B(\mathcal{H})$ de clasa urmei astfel încît $\omega(A) = \text{tr} \rho A$ pentru $A \in B(\mathcal{H})$. Este imediat că $\rho \geq 0$ implică ω pozitivă și dacă în plus $\text{tr} \rho = 1$, atunci $\omega(I) = 1$ și ω este continuă cu norma 1. Astfel mulțimea stărilor se poate identifica cu mulțimea funcționalelor pozitive de normă 1 pe $B(\mathcal{H})$.

Cu aceste elemente se poate formula pe scurt alternativa algebrică:

- totalitatea observabilelor unui sistem cuantic formează o C^* -algebră \mathcal{O} cu unitate;
- stările posibile ale sistemului sunt funcționalele pozitive de normă 1, iar o observabilă $A \in \mathcal{O}$ are valoarea expectată $\omega(A)$ cînd sistemul se află în starea ω ;
- dinamica sistemului este dată de un grup $\{\tau^t\}_{t \in \mathbb{R}}$ de $*$ -automorfisme ale C^* -algebrei \mathcal{O} .

Pentru un sistem ce se află în starea ω , se reobține paradigma tradițională folosind reprezentarea GNS. Intr-adevăr, unei stări ω îi corespunde, conform propoziției 10 din anexa A, tripletul $(\mathcal{H}_\omega, \pi_\omega, \Omega_\omega)$ în care \mathcal{H}_ω este spațiu

hilbert, $\pi_\omega : \mathcal{O} \rightarrow B(\mathcal{H}_\omega)$ este $*$ -morfism și Ω_ω este un vector unitar din \mathcal{H}_ω astfel că

$$\omega(A) = \langle \Omega_\omega, \pi_\omega(A)\Omega_\omega \rangle, \quad A \in \mathcal{O}. \quad (2.7)$$

2.2 Spații Fock

Stările unui sistem cuantic format din n particule identice, dar considerate discernabile, sunt vectori în produsul tensorial $\mathcal{H}^{\otimes n}$, unde \mathcal{H} este spațiul hilbert uniparticulă. Pentru a fi concreți, \mathcal{H} poate fi gândit ca fiind un spațiu, convenabil ales, de funcții de pătrat integrabil; de fapt întotdeauna avem $\mathcal{H} = L_2(S, d\mu)$ pentru un anumit spațiu cu măsură (S, μ) . Spațiul $\mathcal{H}^{\otimes n}$ este generat de vectorii nedecompozabili (sau produs), i.e. de forma

$$f = f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n, \quad \text{cu } f_i \in \mathcal{H}. \quad (2.8)$$

Pentru f, g de această formă (2.8), produsul scalar este definit prin

$$\langle f, g \rangle = \langle f_1, g_1 \rangle \langle f_2, g_2 \rangle \dots \langle f_n, g_n \rangle \quad (2.9)$$

și se extinde prin liniaritate la întreg $\mathcal{H}^{\otimes n}$, pentru simplitate $\mathcal{H}^n \stackrel{\text{not}}{=} \mathcal{H}^{\otimes n}$.

Pentru a descrie un sistem cuantic cu un număr variabil de particule se construiește suma directă

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) = \bigoplus_{n \geq 0} \mathcal{H}^n \quad \text{unde } \mathcal{H}^0 = \mathbb{C}, \quad (2.10)$$

i.e spațiul fock peste spațiul hilbert \mathcal{H} . Un element f din $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ este un șir $f = \{f^{(0)}, f^{(1)}, \dots\}$, cu $f^{(i)} \in \mathcal{H}^i$, pentru care $\sum_{n \geq 0} |f^{(n)}|_{\mathcal{H}^n}^2 \leq \infty$. Produsul scalar în $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ este dat de

$$\langle f, g \rangle = \sum_{n \geq 0} \langle f^{(n)}, g^{(n)} \rangle_{\mathcal{H}^n}, \quad (2.11)$$

unde $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}^n}$ este produsul scalar în \mathcal{H}^n . Spațiul \mathcal{H}^n considerat ca subspațiu în $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ se numește *sectorul n -particulă*. $\mathcal{H}^0 = \mathbb{C}$ se numește *sector vid*, iar vectorul $\Omega \in \mathcal{F}(\mathcal{H})$ de componente $\Omega^{(0)} = 1$ și $\Omega^{(n)} = 0$ pentru $n \geq 1$ se numește *vid Fock*.

Suma directă (2.10) este de fapt descompunerea spațiului fock în subspații proprii ale operatorului număr de particule N definit astfel: domeniul lui N este

$$\mathcal{D}(N) = \{f \in \mathcal{F}(\mathcal{H}) : \sum_{n \geq 0} n^2 |f^{(n)}|_{\mathcal{H}^n}^2 \leq \infty\} \quad (2.12)$$

și acțiunea sa dată prin

$$(Nf)^{(n)} = nf^{(n)} \quad \text{pentru } f \in \mathcal{D}(N).$$

Un subspațiu util al spațiului Fock peste \mathcal{H} este format de stările cu număr finit de particule, i.e

$$\mathcal{F}_0(\mathcal{H}) = \{f \in \mathcal{F}(\mathcal{H}); f = \{f^{(0)}, f^{(1)}, \dots\}, \{i : f^{(i)} \neq 0\} \text{ finită}\}. \quad (2.13)$$

Importanța sa constă în faptul că orice operator cu sens fizic include în domeniul său de definiție subspațiul $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$.

Sunt două construcții utile de “ridicare” a operatorilor uniparticulă din \mathcal{H} la $\mathcal{F}(\mathcal{H})$. Dacă $h : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ este un operator uniparticulă, cuantificatul său $d\Gamma(h)$ se definește astfel: mai întâi se definește h_n pentru vectorii produs $f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n \in \mathcal{H}^n$ prin

$$h_n(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \sum_{i=1}^n f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes h(f_i) \otimes \dots \otimes f_n \quad (2.14)$$

apoi h_n se extinde prin liniaritate la tot \mathcal{H}^n , iar $d\Gamma(h)$ este definit pe $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ prin

$$d\Gamma(h) = \sum_{n \geq 0} h_n, \quad \text{unde } h_0 = 0. \quad (2.15)$$

Cel mai simplu exemplu: dacă I este operatorul unitate în \mathcal{H} atunci cuantificatul său este operatorul număr de particule, $d\Gamma(I) = N$.

Puterea tensorială $u^{\otimes n} : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^n$ a unui operator $u : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ se definește mai întâi pentru vectorii produs $f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n$ prin

$$u^{\otimes n}(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = u(f_1) \otimes u(f_2) \otimes \dots \otimes u(f_n) \quad (2.16)$$

și se extinde prin liniaritate la întreg \mathcal{H}^n . Ridicarea (cuantificarea a doua) lui u la $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ este definită de

$$\Gamma(u) = \sum_{n \geq 0} u^{\otimes n}, \quad \text{unde } u^{\otimes 0} = 1. \quad (2.17)$$

Dacă u este contractiv, în particular dacă u este unitar, atunci $\Gamma(u)$ este definit pe întreg $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ și este contractiv, respectiv unitar.

Modul în care funcționează Γ și $d\Gamma$: fie $h : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ hamiltonianul unei particule libere (sau într-un câmp extern), atunci evoluția stărilor din \mathcal{H} este

dată de grupul de operatori unitari $e^{-ith} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Hamiltonianul unui număr variabil de particule libere este $d\Gamma(h) : \mathcal{F}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{F}(\mathcal{H})$, iar evoluția în spațiul fock este dată de grupul de operatori unitari $e^{-itd\Gamma(h)} : \mathcal{F}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{F}(\mathcal{H})$ și se arată ușor egalitatea

$$\Gamma(e^{-ith}) = e^{-itd\Gamma(h)}. \quad (2.18)$$

De asemenea remarcăm că operațiile Γ și $d\Gamma$ satisfac relațiile

$$\Gamma(uv) = \Gamma(u)\Gamma(v), \quad \text{respectiv} \quad d\Gamma(h+k) = d\Gamma(h) + d\Gamma(k) \quad (2.19)$$

ori de câte ori operatorii din dreapta egalităților sunt definiți, de exemplu pentru h, k autoadjuncți, respectiv u, v contractivi.

Trecerea între sectoare cu număr diferit de particule se face prin folosirea operatorilor de creare și anihilare. Pentru oricare $f \in \mathcal{H}$ operatorul de anihilare $a_f : \mathcal{F}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{F}(\mathcal{H})$ duce sectorul fără particule \mathcal{H}^0 în vectorul $0 \in \mathcal{F}(\mathcal{H})$ și pentru $n \geq 1$ duce sectorul n -particulă \mathcal{H}^n în sectorul $(n-1)$ -particulă \mathcal{H}^{n-1} : pentru vectorii nedecompozabili $f^{(n)} = f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n$ din \mathcal{H}^n , a_f este definit de expresia

$$a_f(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \sqrt{n} \langle f, f_1 \rangle f_2 \otimes f_3 \otimes \dots \otimes f_n, \quad (2.20)$$

care se extinde prin liniaritate la întregul \mathcal{H}^n .

Similar se definește operatorul de creare $a_f^* : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^{n+1}$ prin

$$a_f^*(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \sqrt{n+1} f \otimes f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n. \quad (2.21)$$

În acest mod operatorii a_f, a_f^* sunt definiți cel puțin pe stările cu număr finit de particule $\mathcal{F}_0(\mathcal{H})$, vezi (2.13). Nu este greu de arătat că domeniul de definiție al operatorilor a_f, a_f^* este mai mare și include domeniul de definiție al operatorului număr de particule, a se vedea (2.12).

Să observăm că aplicația $\mathcal{H} \ni f \rightarrow a_f$ este conjugat liniară, în timp ce aplicația $\mathcal{H} \ni f \rightarrow a_f^*$ este liniară.

2.3 Spații fock bosonice și fermionice

În cele de mai sus s-a presupus că particulele identice sunt discernabile, acest lucru este fals, cel puțin în situația în care este dominantă comportarea cuantică. Indiscernabilitatea particulelor spune că “fizica” nu se schimbă

dacă se permută indicii particulelor. Mai precis pentru orice permutare σ a indicilor $\{1, 2, \dots, n\}$ se consideră operatorul $P_\sigma^{(n)} : \mathcal{H}^n \rightarrow \mathcal{H}^n$ definit pentru vectorii produs prin

$$P_\sigma^{(n)}(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = f_{\sigma(1)} \otimes f_{\sigma(2)} \otimes \dots \otimes f_{\sigma(n)}, \quad (2.22)$$

și extins prin liniaritate la întregul \mathcal{H}^n . Indiscernabilitatea particulelor impune ca vectorii $f^{(n)} \in \mathcal{H}^n$ și $P_\sigma^{(n)}(f^{(n)})$ să conducă la aceleași rezultate. Este imediat $P_\sigma^{(n)}$ este unitar și $P_\sigma^{(n)*} = P_{\sigma^{-1}}^{(n)}$ unde σ^{-1} este inversa permutării σ .

Se consideră că particulele se împart în două categorii: bosoni, pentru care funcția de undă este simetrică

$$P_\sigma^{(n)}(f^{(n)}) = f^{(n)},$$

și fermioni pentru care funcția de undă este antisimetrică

$$P_\sigma^{(n)}(f^{(n)}) = -\varepsilon(\sigma)f^{(n)},$$

unde $\varepsilon(\sigma)$ este signatura permutării σ . Pentru a introduce subspațiile relevante descrierii bosonilor sau fermionilor se definesc operatorii $P_\pm : \mathcal{F}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{F}(\mathcal{H})$ astfel: mai întâi pentru vectorii produs $f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n \in \mathcal{H}^n$ se ia

$$P_+(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma} f_{\sigma(1)} \otimes f_{\sigma(2)} \otimes \dots \otimes f_{\sigma(n)}, \quad (2.23)$$

pentru bosoni, respectiv

$$P_-(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) f_{\sigma(1)} \otimes f_{\sigma(2)} \otimes \dots \otimes f_{\sigma(n)} \quad (2.24)$$

pentru fermioni, apoi definiția se extinde prin liniaritate la întreg \mathcal{H}^n și apoi la $\mathcal{F}(\mathcal{H})$. Se vede imediat că pe \mathcal{H}^n , și deci pe $\mathcal{F}(\mathcal{H})$, avem: $P_\pm^2 = P_\pm$ și $P_\pm^* = P_\pm$ i.e. P_\pm sunt proiectori ortogonali. Vectorii simetrici /antisimetrici din $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ sunt imaginea lui P_+ respectiv P_- , astfel spațiul Fock pentru bosoni/fermioni este

$$\mathcal{F}_+(\mathcal{H}) = P_+\mathcal{F}(\mathcal{H}) \quad \text{respectiv} \quad \mathcal{F}_-(\mathcal{H}) = P_-\mathcal{F}(\mathcal{H}). \quad (2.25)$$

Se vede că operatorii $d\Gamma(h)$ și $\Gamma(u)$ definiți anterior prin relațiile (2.14)-(2.17) comută cu operatorii de simetrizare și antisimetrizare P_\pm . Astfel operatorii de ridicare $d\Gamma_\pm(h)$ și $\Gamma_\pm(u)$ sunt corect definiți pe $\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H})$ prin

$$d\Gamma_\pm(h) = d\Gamma(h)P_\pm \quad \text{respectiv} \quad \Gamma_\pm(h) = \Gamma(h)P_\pm,$$

astfel operațiile $d\Gamma$ și Γ ridică operatori uniparticulă din \mathcal{H} la operatori în $\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H})$. De asemenea relațiile (2.18), (2.19) rămân adevărate pentru $d\Gamma_\pm(h)$ și $\Gamma_\pm(u)$.

Operatorii de anihilare și creare se definesc în $\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H})$ ca restricții ale operatorilor corespunzători (2.20) și (2.21) din $\mathcal{F}(\mathcal{H})$, i.e.

$$a_{\pm,f}^\# = P_\pm a_f^\# P_\pm, \quad (2.26)$$

unde $a^\#$ notează a sau a^* .

Spațiile $\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H})$ sunt invariante pentru operatorul de anihilare a_f . Aceasta se poate vedea astfel. Fie $\tau_{i,j}^{(n)}$ transpoziția elementelor i, j din mulțimea $\{1, 2, \dots, n\}$ și notăm, prin abuz, tot cu $\tau_{i,j}^{(n)}$ operatorul definit de relația (2.22) pentru $\sigma = \tau_{i,j}^{(n)}$. Este evident că elementul $f^{(n)} \in \mathcal{H}^n$ este în imaginea lui P_\pm dacă și numai dacă $\tau_{i,j}^{(n)}(f^{(n)}) = \pm f^{(n)}$, pentru oricare $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. Se vede că pentru vectorii de forma $f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n \in \mathcal{H}^n$ avem

$$\tau_{i,j}^{(n-1)} a_f(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = a_f \tau_{i+1,j+1}^{(n)}(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n).$$

Ca urmare egalitatea $\tau_{i,j}^{(n-1)} a_f = a_f \tau_{i+1,j+1}^{(n)}$ are loc pe \mathcal{H}^n , pentru orice $i, j \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ și $a_f(f^{(n)})$ are aceeași simetrie ca $f^{(n)}$. Astfel pe $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ are loc egalitatea

$$a_f P_\pm = P_\pm a_f P_\pm. \quad (2.27)$$

Prin trecere la operatorii adjuncți avem relația

$$P_\pm a_f^* = P_\pm a_f^* P_\pm. \quad (2.28)$$

Astfel definiția (2.26) a operatorilor de anihilare și creare în $\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H})$ se poate rescrie mai simplu

$$a_{\pm,f} = a_f P_\pm, \quad a_{\pm,f}^* = P_\pm a_f^*. \quad (2.29)$$

Folosind relațiile (2.20) și (2.21) se verifică că

$$a_{+,g} a_{+,f}^*(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \sum_{k=1}^{n+1} \langle g, f_k \rangle P_+ f_1 \otimes \dots \otimes \widehat{f}_k \otimes \dots \otimes f_{n+1},$$

unde $f_{n+1} = f$, iar $\widehat{}$ arată că în expresie simbolul acoperit trebuie omis. Similar,

$$a_{+,f}^* a_{+,g}(f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n) = \sum_{k=1}^n \langle g, f_k \rangle P_+ f_1 \otimes \dots \otimes \widehat{f}_k \otimes \dots \otimes f_{n+1}.$$

Din aceste egalități rezultă că operatorii de anihilare și creare bosnici definiți pe spațiul fock $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ satisfac *relațiile canonice de comutare* (CCR):

$$\begin{aligned} [a_{+,g}, a_{+,f}^*] &= \langle g, f \rangle I \\ [a_{+,g}, a_{+,f}] &= [a_{+,g}^*, a_{+,f}^*] = 0, \end{aligned} \tag{2.30}$$

pentru orice $f, g \in \mathcal{H}$.

Similar, rezultă că operatorii de anihilare și creare fermionici definiți pe spațiul fock $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ satisfac *relațiile canonice de anticomutare* (CAR):

$$\begin{aligned} \{a_{-,g}, a_{-,f}^*\} &= \langle g, f \rangle I \\ \{a_{-,g}, a_{-,f}\} &= \{a_{-,g}^*, a_{-,f}^*\} = 0. \end{aligned} \tag{2.31}$$

În lucrare suntem interesați numai de sisteme de fermioni, astfel că de acum înainte operatorii de anihilare și creare fermionici nu mai poartă indicele – ci vor fi notați simplu a_f sau $a(f)$, respectiv a_f^* sau $a^*(f)$.

2.4 Algebra relațiilor de anticomutare

În secțiunea precedentă fiecărei stări uniparticulă $f \in \mathcal{H}$ i s-a atașat perechea de operatori de anihilare $a_{\pm, f} : \mathcal{F}_{\pm}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{F}_{\pm}(\mathcal{H})$, astfel că au loc relațiile (2.30) respectiv (2.31). Dar de fapt știm cu siguranță că domeniile de definiție ale operatorilor $a_{\pm, f}$ cuprind cel puțin $\mathcal{F}_{\pm 0}(\mathcal{H})$ i.e. stările simetrice / antisimetrice cu număr finit de particule. Astfel în egalitățile (2.30) și (2.31) au loc cel puțin pe $\mathcal{F}_{\pm 0}(\mathcal{H})$.

Ne limităm în continuare la fermioni. În acest caz operatorii a_f, a_f^* sunt mărginiți. Într-adevăr, pentru $\psi \in \mathcal{F}_{-0}(\mathcal{H})$ relațiile de anticomutare implică

$$|a_f^* \psi|^2 = \langle a_f^* \psi, a_f^* \psi \rangle = \langle \psi, a_f a_f^* \psi \rangle = \langle \psi, (|f|^2 - a_f^* a_f) \psi \rangle,$$

adică $|a_f^* \psi|^2 + |a_f \psi|^2 = |f|^2 |\psi|^2$. Deoarece $\mathcal{F}_{-0}(\mathcal{H})$ este dens în $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ rezultă $|a_f^\#| \leq |f|$. Mai mult, deoarece pentru vectorul de vid $\Omega = \{1, 0, 0, \dots\}$ avem $a_f^* \Omega = \{0, f, 0, 0, \dots\}$, deci $|a_f^* \Omega| = |f|$ și obținem $|a_f^*| \geq |f|$. Analog, folosind vectorul $a_f \Omega = \{0, f, 0, 0, \dots\}$, obținem $|a_f| \geq |f|$. Deci operatorii a_f și a_f^* sunt definiți pe întreg $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ și

$$|a_f| = |a_f^*| = |f|. \tag{2.32}$$

Așadar mulțimea operatorilor de anihilare $\{a_f : f \in \mathcal{H}\}$ este inclusă în mulțimea $B(\mathcal{F}_-(\mathcal{H}))$ a operatorilor mărginiți pe spațiul fock $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$. Cum $B(\mathcal{F}_-(\mathcal{H}))$ formează o C^* -algebră, rezultă că există o cea mai mică C^* -algebră care conține mulțimea $\{a_f : f \in \mathcal{H}\}$. Notăm această C^* -algebră $CAR_{\mathcal{F}}(\mathcal{H})$, deoarece construcția depinde de spațiul $B(\mathcal{F}_-(\mathcal{H}))$. În fapt este adevărată următoarea teoremă [7].

Teoremă. (unicitatea CAR) Fie \mathcal{H} un spațiu hilbert și fie $\mathcal{A}_i, i = 1, 2$ două C^ -algebre cu unitate generate de elementele $a_f^{(i)}, f \in \mathcal{H}$, care satisfac*

$$\begin{aligned} (1) \quad & f \rightarrow a_f^{(i)} \text{ este conjugat liniară,} \\ (2) \quad & \{a_f^{(i)}, a_g^{(i)}\} = 0 \\ (3) \quad & \{a_f^{(i)}, a_g^{(i)*}\} = \langle f, g \rangle I \end{aligned} \tag{2.33}$$

pentru $f, g \in \mathcal{H}, i = 1, 2$.

În aceste condiții există, și este unic, un $$ -izomorfism $\alpha : \mathcal{A}_1 \rightarrow \mathcal{A}_2$ astfel că*

$$\alpha(a_f^{(1)}) = a_f^{(2)}, \quad f \in \mathcal{H}.$$

Deci, orice C^* -algebră ce satisface condițiile teoremei este $*$ -izomorfă cu algebra $CAR_{\mathcal{F}}(\mathcal{H})$, astfel că modulo un $*$ -izomorfism există o singură C^* -algebră ce satisface condițiile (1)-(3) din teoremă, aceasta se numește C^* -algebra (sau algebra) relațiilor de anticomutare peste spațiul hilbert \mathcal{H} și se notează $CAR(\mathcal{H})$.

Dacă h, u sunt operatori uniparticulă astfel că $h, u \in CAR_{\mathcal{F}}(\mathcal{H})$, atunci avem $d\Gamma(h), \Gamma(u) \in CAR_{\mathcal{F}}(\mathcal{H})$. Și deoarece $CAR_{\mathcal{F}}(\mathcal{H})$ și $CAR(\mathcal{H})$ sunt $*$ -izomorfe, operațiile de ridicare $d\Gamma$ și Γ au sens pentru astfel de operatori. Pentru operatorii uniparticulă $f \langle g, \cdot \rangle$ din \mathcal{H} avem $d\Gamma(f \langle g, \cdot \rangle) = a^*(f)a(g)$ și ca urmare operatorii compacți din \mathcal{H} (adică închiderea normică a mulțimii operatorilor de rang finit din \mathcal{H}) sunt în $CAR_{\mathcal{F}}(\mathcal{H})$, deci în $CAR(\mathcal{H})$. În particular operatorii de clasa urmei din \mathcal{H} au cuantificatul în $CAR(\mathcal{H})$. O consecință importantă a unicității algebrei $CAR(\mathcal{H})$ este următoarea teoremă.

Teoremă (Transformarea Bogoliubov) Fie $u, v : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ operatori mărginiți, u liniar, v antiliniar care satisfac condițiile

$$\begin{aligned} u^*v + v^*u &= 0 = uv^* + vu^* \\ u^*u + v^*v &= I = uu^* + vv^*. \end{aligned} \tag{2.34}$$

Există și este unic un $*$ -automorfism α al algebrei $CAR(\mathcal{H})$ astfel că

$$\alpha(a(f)) = a(uf) + a^*(vf). \quad (2.35)$$

In acest caz inversul lui α este

$$\alpha^{-1}(a(f)) = a(u^*f) + a^*(v^*f). \quad (2.36)$$

Intr-adevăr, dacă sunt îndeplinite condițiile (2.34), atunci aplicația $\mathcal{H} \ni f \rightarrow a'(f) = a(uf) + a^*(vf)$ satisface condițiile (2.33). Deci, conform teoremei de unicitate a $CAR(\mathcal{H})$, există $*$ -automorfismul α al algebrei $CAR(\mathcal{H})$ astfel că $a'(f) = \alpha(a(f))$, i.e. este adevărată ecuația (2.35).

Un caz particular al transformării Bogoliubov se obține pentru u unitar și $v = 0$, astfel aplicația $a(f) \rightarrow a(uf)$, $f \in \mathcal{H}$ se extinde la un $*$ -automorfism al $CAR(\mathcal{H})$, pentru orice unitar u .

2.5 Stări cvasilibere pe algebra CAR

Algebra observabilelor unui sistem de fermioni, având spațiul hilbert \mathcal{H} drept spațiu uniparticulă, este algebra $CAR(\mathcal{H})$, ca urmare o stare a sistemului va fi specificată de o funcțională liniară pozitivă $\omega : CAR(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ cu $\omega(I) = 1$. In cele ce urmează vom presupune că spațiul hilbert \mathcal{H} este separabil. Pentru o stare fixată ω , aplicația

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \ni (f, g) \rightarrow \omega(a^*(f)a(g))$$

este o formă sesquiliniară (liniară în f și conjugat liniară în g). Deoarece ω este continuă de normă 1, avem $|\omega(a^*(f)a(g))| \leq |a^*(f)| |a(g)| = |f| |g|$, adică forma sesquiliniară este continuă. Ca urmare există un operator $\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ astfel că

$$\omega(a^*(f)a(g)) = \langle g, \rho f \rangle \quad f, g \in \mathcal{H}, \quad (2.37)$$

este imediat că ρ este pozitiv și de normă cel mult 1: $0 \leq \rho \leq 1$, un astfel de operator se numește *matrice densitate*.

Pentru operatorii $c : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ de clasa urmei, are loc egalitatea

$$\omega(d\Gamma(c)) = \text{tr} \rho c. \quad (2.38)$$

Intr-adevăr, după cum am văzut în secțiunea precedentă, c fiind de clasa urmei avem $d\Gamma(c) \in CAR(\mathcal{H})$. De asemenea c de clasa urmei, atrage după

sine că într-o bază ortonormată oarecare $\{f_1, f_2, \dots\}$, avem $c = \sum_{i,j} c_{i,j} f_i \langle f_j, \cdot \rangle$, convergența fiind normică. Deci $d\Gamma(c) = \sum_{i,j} c_{i,j} a^*(f_i) a(f_j)$ și $\omega(d\Gamma(c)) = \sum_{i,j} c_{i,j} \langle f_j, \rho f_i \rangle = \text{tr} \rho c$.

Pe de altă parte dacă ρ este un operator pozitiv cu $0 \leq \rho \leq 1$ atunci se poate defini pe $CAR(\mathcal{H})$ starea ω_ρ prin

$$\omega_\rho(a^*(f_n) \dots a^*(f_1) a(g_1) \dots a(g_m)) = \delta_{n,m} \det(\langle g_i, \rho f_j \rangle). \quad (2.39)$$

Este evident că matricea densitate ce corespunde stării ω_ρ prin relația (2.37) este chiar ρ .

O stare se numește *cvasiliberă* dacă este determinată de matricea sa densitate prin relația (2.39).

Fie un sistem de fermioni liberi cu hamiltonianul uniparticulă h , atunci dinamica sa heisenberg este dată de grupul de automorfisme

$$\alpha^t(A) = e^{itd\Gamma-(h)} A e^{-itd\Gamma-(h)} \quad (2.40)$$

unde $A \in B(\mathcal{F}_-(\mathcal{H}))$. Evident C^* -algebra operatorilor mărginiți pe spațiul fock antisimetric $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ include $CAR(\mathcal{H})$ și $CAR(\mathcal{H})$ este invariant la α^t . Pentru a vedea cum acționează α^t pe $CAR(\mathcal{H})$ reamintim că $e^{itd\Gamma(h)} = \Gamma(e^{ith})$. Notăm $e^{ith} = u$, atunci putem scrie pentru un vector de tip produs $f^{(n)} = f_1 \otimes f_2 \otimes \dots \otimes f_n$

$$\alpha^t(a(f)) f^{(n)} = \Gamma(u) a(f) \Gamma(u^*) f^{(n)} = \Gamma(u) a(f) (u^* f_1 \otimes \dots \otimes u^* f_n) =$$

$$\Gamma(u) \sqrt{n} \langle f, u^* f_1 \rangle (u^* f_2 \otimes \dots \otimes u^* f_n) = \sqrt{n} \langle u f, f_1 \rangle f_2 \otimes \dots \otimes f_n = a(u f) f^{(n)}.$$

Rezultă $\alpha^t(a(f)) = a(u f)$ pe $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ și cum $\Gamma(u), \Gamma(u^*)$ comută cu operatorul de antisimetrizare, egalitatea are loc pe $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$. Astfel avem

$$\alpha^t(a(f)) = e^{itd\Gamma-(h)} a(f) e^{-itd\Gamma-(h)} = a(e^{ith} f), \quad (2.41)$$

și deoarece α^t este *-morfism

$$\alpha^t\left(\prod_i a^\sharp(f_i)\right) = \prod_i a^\sharp(e^{ith} f_i) \quad (2.42)$$

relații ce exprimă simplu dinamica sistemului de fermioni în $CAR(\mathcal{H})$. Remarcăm că α^t este un grup de transformări Bogoliubov (2.35) cu $v = 0$.

Dinamica α^t a observabilelor definește dinamica stărilor: dacă ω^0 este starea sistemului la $t = 0$ atunci prin definiție starea la momentul t este

$$\omega^t(A) = \omega^0(\alpha^t(A)) \quad A \in CAR(\mathcal{H}). \quad (2.43)$$

Presupunem că ω^0 este o stare cvasiliberă cu matricea densitate ρ^0 , atunci

$$\omega^t\left(\prod_i a^\sharp(f_i)\right) = \omega^0\left(\alpha^t\left(\prod_i a^\sharp(f_i)\right)\right) = \omega^0\left(\prod_i a^\sharp(e^{ith} f_i)\right)$$

și conform cu (2.39) ω^t este stare cvasiliberă cu matricea densitate $\langle g, \rho^t f \rangle = \omega^0(a^*(e^{ith} f)a(e^{ith} g)) = \langle e^{ith} g, \rho^0 e^{ith} f \rangle = \langle g, e^{-ith} \rho^0 e^{ith} f \rangle$.

Astfel automorfismul (2.40) invariază mulțimea stărilor cvasilibere și matricele densitate corespunzătoare evoluează conform ecuației

$$\rho^t = e^{-ith} \rho^0 e^{ith}. \quad (2.44)$$

3 HAMILTONIANUL UNIPARTICULA

3.1 Descrierea modelului

După cum am precizat, pentru obține o caracterizare cât mai explicită a stării NESS finale, considerăm un model foarte simplu. Sistemul constă din două rezervoare de particule $\mathcal{R}_{1,2}$, conectate printr-un fir cuantic \mathcal{S} . Rezervoarele conțin gaze fermi, particulele putând ocupa nodurile unor rețele infinite

$$\Lambda_{1,2} = \mathbb{Z}^{d_{1,2}} \quad \text{sau} \quad \Lambda_{1,2} = \mathbb{Z}^{d_{1,2}-1} \times \mathbb{Z}_+, \quad (3.1)$$

unde cu \mathbb{Z} , \mathbb{Z}_+ am notat mulțimea întregilor, respectiv mulțimea întregilor strict pozitivi.

Spațiile hilbert uni-particulă pentru $\mathcal{R}_{1,2}$ vor fi

$$\mathcal{H}_i = l_2(\Lambda_i) = \left\{ f : \Lambda_i \rightarrow \mathbb{C}; \|f\|^2 = \sum_{x \in \Lambda_i} |f(x)|^2 < \infty \right\}, \quad i = 1, 2. \quad (3.2)$$

Hamiltonienii uni-particulă ai rezervoarelor $\mathcal{R}_{1,2}$ sunt operatorii energie cinetică în aproximația electronilor strâns legați (tight binding approximation), i.e. sunt $1/2 \times$ operatorul laplace pe rețea

$$(h_i f)(x) = d_i f(x) - \frac{1}{2} \sum_{y \in \Lambda_i, |y-x|=1} f(y), \quad i = 1, 2. \quad (3.3)$$

Nano-firul \mathcal{S} este modelat tot ca un gaz fermi în aceeași aproximație, particulele putând ocupa nodurile $\{1, 2, \dots, n\}$. Spațiul uni-particulă va fi $\mathcal{H}_{\mathcal{S}} = l_2(\Lambda_{\mathcal{S}}) \equiv \mathbb{C}^n$, $\Lambda_{\mathcal{S}} = \{1, 2, \dots, n\}$ iar hamiltoniaul uni-particulă are expresia

$$(h_{\mathcal{S}} f)_i = (1 + e_g) f_i - 1/2(f_{i-1} + f_{i+1}), \quad i = 1, \dots, n \quad (f_0 = f_{n+1} = 0), \quad (3.4)$$

unde parametrul e_g joacă rolul unui potențial ajustabil de poartă (gate potential).

În consecință spațiul hilbert uni-particulă pentru sistemul întreg $\mathcal{R}_1 \cup \mathcal{S} \cup \mathcal{R}_2$ este

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_{\mathcal{S}} \oplus \mathcal{H}_2 = l_2(\Lambda), \quad \text{unde } \Lambda = \Lambda_1 \cup \Lambda_{\mathcal{S}} \cup \Lambda_2, \quad (3.5)$$

iar evoluția stărilor uniparticulă ale sistemului necuplat este determinată de hamiltonianul

$$h_0 = h_1 \oplus h_{\mathcal{S}} \oplus h_2 \quad (3.6)$$

Interacția între rezervoare și firul \mathcal{S} este dată de elemente de matrice de tunelare între capetele firului și câte un nod din fiecare rezervor. Mai precis, notăm cu α_1 nodul $(0, \dots, 0) \in \mathbb{Z}^{d_1}$ dacă $\Lambda_1 = \mathbb{Z}^{d_1}$, sau $(0, \dots, 0, 1) \in \mathbb{Z}^{d_1-1} \times \mathbb{Z}_+$ dacă $\Lambda_1 = \mathbb{Z}^{d_1-1} \times \mathbb{Z}_+$ și notăm cu α_2 nodul analog din Λ_2 . Rezervoarele și firul sunt cuplate prin intermediul perechilor de noduri $(\alpha_1, 1)$ și (α_2, n) , interacția fiind dată de matricea

$$v_{x,y} = \begin{cases} t, & \text{dacă } \{x, y\} = \{\alpha_1, 1\} \text{ sau } \{\alpha_2, n\} \\ 0, & \text{altfel} \end{cases} \quad (3.7)$$

Interacția este $v = 0$, pentru timpi mai mici ca 0, pentru timpi pozitivi se face joncțiunea între rezervoare și fir, $v \neq 0$ și evoluția stărilor uni-particulă ale sistemului cuplat este guvernată de hamiltonianul uniparticulă:

$$h = h_0 + v. \quad (3.8)$$

Hamiltonienilor uniparticulă h_0, h le corespund în spațiul fock $\mathcal{F}_-(\mathcal{H})$ hamiltonienii

$$H_0 = \sum_{x,y} h_0(x,y) a_x^* a_y, \quad \text{respectiv} \quad H = \sum_{x,y} h(x,y) a_x^* a_y, \quad (3.9)$$

unde $h_0(x,y)$, $h(x,y)$ sunt elementele de matrice ale hamiltonienilor h_0, h iar $a_x^* = a^*(\delta_x)$, $a_x = a(\delta_x)$ sunt operatorii de creare/anihilare pentru funcții delta $\delta_x(\cdot) \in \mathcal{H}$, $x \in \Lambda$ ($\delta_x(y) = 0$ pentru $y \neq x$ și $\delta_x(x) = 1$).

3.2 Proprietățile spectrale ale sistemului necuplat

Ne ocupăm de hamiltonienii rezervoarelor, cum acestea sunt similare este suficient să avem în vedere numai unul din ele. Ca urmare vom omite indicii 1, 2 și ne vom ocupa de operatorul $T : l^2(\Lambda) \rightarrow l^2(\Lambda)$

$$(Tf)(x) = df(x) - \frac{1}{2} \sum_{y \in \Lambda, |y-x|=1} f(y), \quad i = 1, 2. \quad (3.10)$$

Considerăm mai întâi $\Lambda = \mathbb{Z}^d$. În acest caz T are spectru absolut continuu, are funcțiile proprii generalizate $\psi_k \in l^\infty(\Lambda)$ indexate de zona Brillouin $k \in B^d \equiv [-\pi, \pi)^d$

$$\psi_k(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{ikx}, \quad k \in B^d \quad (3.11)$$

și valorile proprii generalizate (legea de dispersie)

$$\omega(k) = 2(\sin^2 \frac{k_1}{2} + \sin^2 \frac{k_2}{2} + \dots + \sin^2 \frac{k_d}{2}). \quad (3.12)$$

De fapt, dacă în membrul drept al relației (3.3) considerăm $f \in l^\infty(\Lambda)$, atunci rezultatul este de asemenea în $l^\infty(\Lambda)$, astfel că (3.3) definește o extensie a operatorului T , $\tilde{T} : l^\infty(\Lambda) \rightarrow l^\infty(\Lambda)$. Pentru această extensie avem $\tilde{T}\psi_k = \omega(k)\psi_k$, deci ψ_k , $\omega(k)$ sunt funcții proprii, respectiv valori proprii “autentice” pentru operatorul \tilde{T} .

Prin intermediul funcțiilor proprii generalizate ψ_k se definește operatorul $u : l^2(\Lambda) \rightarrow l^2(B^d)$:

$$(uf)(k) \stackrel{\text{not}}{=} \hat{f}(k) = \langle \psi_k, f \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} e^{-ikx} f(x), \quad f \in l^2(\Lambda), k \in B^d, \quad (3.13)$$

u este unitar și inversul său $u^{-1} = u^*$ este

$$f(x) = u^*(\hat{f})(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{B^d} e^{ikx} \hat{f}(k) dk, \quad \hat{f} \in l^2(B^d), x \in \mathbb{Z}^d. \quad (3.14)$$

În fapt $f(x)$, $x \in \mathbb{Z}^d$ sunt coeficienții Fourier ai funcției periodice \hat{f} , cu perioadă 2π în fiecare din cele d variabile k_i . Operatorul T este unitar echivalent cu operatorul de înmulțire cu $\omega(k)$:

$$[uTu^*\hat{f}](k) = \omega(k)\hat{f}(k).$$

Spectrul lui T este mulțimea valorilor funcției $\omega(k)$, i.e. conform cu relația (3.12) avem $\sigma(T) = [0, 2d]$. Rezolventa operatorului de înmulțire cu $\omega(k)$ este operatorul de înmulțire cu

$$1/(\omega(k) - z), \quad z \in \mathbb{C} \setminus [0, 2d]$$

ca urmare rezolventa lui T în $l^2(\Lambda)$ va avea elementele de matrice

$$R(z; x, y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{B^d} \frac{e^{ik(y-x)}}{\omega(k) - z} dk, \quad x, y \in \mathbb{Z}^d. \quad (3.15)$$

Deci $R(z; x, y) = R(z, x - y, 0)$, astfel că putem folosi și notația mai simplă $R(z; x, y) = R(z; x - y)$, și deoarece $\omega(k) = \omega(-k)$, avem $R(z; x) = R(z, -x)$, adică $R(z; x) = R(z, |x|)$.

In cazul unidimensional integrala (3.15) se evaluează folosind teorema reziduurilor și $R(z; x)$ are forma simplă:

$$R(z; x) = 2 \frac{\zeta_1^{|x|}(z)}{\zeta_2(z) - \zeta_1(z)}, \quad x \in \mathbb{Z} \quad (3.16)$$

unde $\zeta_1(z) = 1 - z + \sqrt{z}\sqrt{z-2}$, $\zeta_2(z) = 1 - z - \sqrt{z}\sqrt{z-2}$, aici $\sqrt{z} = \sqrt{|z|}e^{-\frac{\arg(z)}{2}}$, $\arg(z) \in [0, 2\pi)$. Se vede că $|\zeta_{1,2}| = 1$ pentru $z \in \sigma(T) = [0, 2]$ și $|\zeta_1| < 1$, $|\zeta_2| > 1$ pentru $z \notin \sigma(T)$. Astfel pentru z în afara spectrului operatorului T rezolventa sa $R(z; x)$ cade exponențial cu $|x|$.

Proprietatea de cădere exponențială a rezolventei $R(z, \cdot)$ este adevărată pentru o dimensiune d arbitrară dacă z se află în afara spectrului operatorului T . Intr-adevăr integrandul din ecuația (3.15) este funcție analitică de k și integrarea se face pe B^d care este un produs a d cercuri unidimensionale. Dacă $z \notin \sigma(T) = [0, 2d]$, atunci $\omega(k) - z \neq 0$ pe B^d și conturul de integrare în (3.15) se poate deforma astfel că $\Im k(y-x) \geq \delta|x-y|$ pe conturul deformat, cu $\delta(z) > 0$ funcție crescătoare de distanța lui z la $\sigma(T)$. Astfel pentru $z \notin \sigma(T) = [0, 2d]$ avem

$$|R(z; x, y)| \leq C e^{-\delta|x-y|} \quad x, y \in \mathbb{Z}^d \quad (3.17)$$

unde $C = C(z, d) > 0$ este descrescătoare, și $\delta = \delta(z, d)$ este crescătoare cu distanța lui z la $\sigma(T)$.

O altă proprietate a rezolventei este faptul că elementele sale de matrice $R(z; x, y)$ au limite finite când z tinde către un punct din spectru, mai exact există $\lim_{\varepsilon \searrow 0} R(e + i\varepsilon, x, y) = R(e + i0, x, y)$ pentru $e \in \sigma(T)$ (se notează limita cu $R(e + i0, x, y)$ deoarece există și limita din semiplanul inferior $R(e - i0, x, y) \neq R(e + i0, x, y)$). Integrala (3.15) se scrie sub forma

$$R(e + i\varepsilon; x, y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2d} \frac{dt}{t - e + i\varepsilon} \int_{\omega(k)=t} e^{ik(y-x)} d\mu_t(k), \quad x, y \in \mathbb{Z}^d. \quad (3.18)$$

unde $d\mu_t(k)$ este măsura indusă pe suprafața de nivel constant $\omega(k) = t$ de măsura lebesgue din B^d . Notăm

$$\hat{\mu}(t, x - y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\omega(k)=t} e^{ik(y-x)} d\mu_t(k) \quad (3.19)$$

și formula Sokhotski $\frac{1}{x} = P(\frac{1}{x}) + i\pi\delta(x)$ (unde cu P se notează partea principală) ne dă

$$R(e + i0; x, y) = P \int_0^{2d} \frac{dt}{t - e} \hat{\mu}(t, x - y) + i\pi \hat{\mu}(e, x - y). \quad (3.20)$$

Elementele de matrice $R(e + i0; x, y)$ au de asemenea proprietăți de cădere pentru $|x - y| \rightarrow \infty$, anume, pentru $d \geq 2$, avem [17]

$$R(e + i0; x, y) = O(|x - y|^{-1/2}) \quad (3.21)$$

uniform pe compacte în $[0, 2d] \setminus \{0, 2, \dots, 2d\}$. Pentru $d = 1$, avem direct din (3.16)

$$R(e + i0; x, y) = i \frac{e^{i\alpha|y-x|}}{\sqrt{e(2-e)}}, \quad \alpha = \arctan \frac{\sqrt{e(2-e)}}{1-e}, \quad (3.22)$$

deci pentru $d = 1$ nu avem cădere la ∞ , elementele de matrice fiind $O(1)$.

Considerăm în continuare $\Lambda = \mathbb{Z}^{d-1} \times \mathbb{Z}_+$. În acest caz operatorul (3.3) poate fi văzut ca sumă directă a doi operatori de același tip unul pe \mathbb{Z}^{d-1} și celălalt pe \mathbb{Z}_+ (întregii strict pozitivi). Să notăm pentru moment cu T operatorul definit de (3.3) pe \mathbb{Z} și cu T_+ operatorul definit de aceeași relație pe \mathbb{Z}_+ , acesta din urmă se scrie

$$(T_+ f)(i) = f(i) - \frac{1}{2}(f_{i-1} + f_{i+1}), \quad f(0) = 0.$$

Dacă se identifică $l^2(\mathbb{Z}_+)$ cu subspațiul $l_{ant}^2(\mathbb{Z})$ al funcțiilor antisimetrice din $l^2(\mathbb{Z})$, se vede că acțiunea lui T pe acest subspațiu este identică cu acțiunea lui T_+ pe $l^2(\mathbb{Z}_+)$. Mai precis se consideră operatorul $u : l^2(\mathbb{Z}_+) \rightarrow l_{ant}^2(\mathbb{Z})$ definit prin

$$(u f)(i) = \begin{cases} f(i) & \text{pentru } i \in \mathbb{Z}_+ \\ 0 & \text{pentru } i = 0 \\ -f(-i) & \text{pentru } i \notin \mathbb{Z}_+ \end{cases}$$

și se vede că $T u f = u T_+ f$, i.e proprietățile lui T_+ se deduc din cele ale lui T restrâns la subspațiul invariant $l_{ant}^2(\mathbb{Z})$. Deoarece din perechea de funcții proprii generalizate $\sim \psi(k, x), \psi(-k, x)$ ale lui T obținem o singură funcție antisimetrică $\sim \sin(kx)$, rezultă că: mulțimea indecșilor k se restrânge la $(0, \pi)$,

$\sqrt{2/\pi} \sin(kx)$ sunt funcțiile proprii generalizate pentru T_+ , iar legea de dispersie este neschimbată i.e. $\omega(k) = 2 \sin^2(k/2)$.

Revenim la cazul general i.e. $\Lambda = \mathbb{Z}^{d-1} \times \mathbb{Z}_+$ și T dat de (3.3). După cum am amintit T este o sumă directă de operatori deja analizați și se obține că: spectrul lui T este absolut continuu, $\sigma(T) = [0, 2d]$, funcțiile proprii generalizate ale lui T sunt indexate de $B^d = [-\pi, \pi]^{d-1} \times (0, \pi)$

$$\psi_k(x) = \frac{2}{(2\pi)^{d/2}} e^{ik'x'} \sin k_d x_d, \quad (x', x_d) \in \Lambda \quad (k', k_d) \in B^d, \quad (3.23)$$

iar legea de dispersie $\omega(k)$ este dată tot de (3.12). Analogul operatorului unitar (3.13) se definește la fel i.e.

$$(uf)(k) \stackrel{\text{not}}{=} \hat{f}(k) = \sum_{x \in \Lambda} \overline{\psi(k, x)} f(x), \quad f \in l^2(\Lambda), \quad k \in B^d, \quad (3.24)$$

cu $\psi(k, \cdot)$ date de (3.23). Operatorul $u : l^2(\Lambda) \rightarrow l^2(B^d)$ este unitar $u^* = u^{-1}$ și are expresia

$$f(x) = u^*(\hat{f})(x) = \int_{B^d} \psi(k, x) \hat{f}(k) dk, \quad \hat{f} \in l^2(B^d), \quad x \in \mathbb{Z}^d. \quad (3.25)$$

Pentru rezolventă avem expresia similară cu (3.15)

$$R(z; x, y) = \int_{B^d} \frac{\overline{\psi(k, x)} \psi(k, y)}{\omega(k) - z} dk, \quad x, y \in \mathbb{Z}^d. \quad (3.26)$$

Proprietățile de cădere ale rezolventei se obțin ușor deoarece ea se exprimă în funcție de rezolventa (3.15). Pentru a o distinge de (3.26) notăm pentru moment rezolventa (3.15) cu $R_\infty(z; x, y)$ și pentru $x = (x_1, \dots, x_{d-1}, x_d)$ notăm $r(x) = (x_1, \dots, x_{d-1}, -x_d)$, atunci se vede prin calcul direct că

$$R(z; x, y) = R_\infty(z; x, y) - R_\infty(z; x, r(y)) \quad (3.27)$$

Ne ocupăm acum de h_S . Spectrul și funcțiile proprii ale operatorului (3.4)

$$(h_S f)_i = (1 + e_g) f_i - 1/2(f_{i-1} + f_{i+1}), \quad i = 1, \dots, n \quad (f_0 = f_{n+1} = 0), \quad (3.28)$$

sunt bine cunoscute. Vectorii proprii și valorile proprii sunt

$$\psi_m(i) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin(q_m i), \quad i \in \{1, 2, \dots, n\}, \quad (3.29)$$

respectiv

$$\varepsilon_m = e_g + 2 \sin^2(q_m/2) \quad (3.30)$$

și sunt indexate de $q_m = m\pi/(n+1)$, $m = 1, 2, \dots, n$

3.3 Proprietățile spectrale ale sistemului cuplat

În continuare ne ocupăm cu analiza spectrală a hamiltonianului uniparticulă h . Vom adopta un cadru ceva mai general, care include desigur situația anterioară. Considerăm următoarele condiții:

A1 Spațiul hilbert uni-particulă este suma ortogonală

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_2,$$

cu $\dim \mathcal{H}_S = n < \infty$;

A2 În reprezentarea matriceală asociată cu această descompunere a spațiului hilbert \mathcal{H} , hamiltonianul neperturbat h_0 și perturbația v au următoarea structură

$$h_0 = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 \\ 0 & h_S & 0 \\ 0 & 0 & h_2 \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} 0 & \tau_1^* & 0 \\ \tau_1 & 0 & \tau_2 \\ 0 & \tau_2^* & 0 \end{pmatrix}.$$

unde h_i , $i = 1, 2$, au spectrele absolut continue egale cu intervale mărginite $\sigma(h_i) = I_i = [e_i^-, e_i^+] \subset \mathbb{R}$ și $\tau_i : \mathcal{H}_i \rightarrow \mathcal{H}_S$. De asemenea presupunem,

$$(e_1^-, e_1^+) \cap (e_2^-, e_2^+) \neq \emptyset;$$

A3 Notăm cu π_i suportul stîng al operatorului τ_i (i.e. proiectorul ortogonal pe subspațiul $\tau_i^*(\mathcal{H}_S) \subset \mathcal{H}_i$). Pentru **orice** $x \in (e_i^-, e_i^+)$, operatorii

$$\pi_i R_i(x + i\epsilon)|_{\pi_i(\mathcal{H}_i)}$$

au limite pentru $\epsilon \searrow 0$ și sunt îndeplinite inegalitățile

$$\lim_{\epsilon \searrow 0} \pi_i \Im R_i(x + i\epsilon)|_{\pi_i(\mathcal{H}_i)} > 0,$$

unde R_i este rezolventa lui h_i , $i = 1, 2$.

Fie $\mathcal{X} \subset \mathcal{H}$ un subspațiu al spațiului hilbert \mathcal{H} și $A : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$ un operator (în genral mărginit). Dacă \mathcal{X}^\perp este ortogonalul lui \mathcal{X} în \mathcal{H} , atunci $\mathcal{H} = \mathcal{X} \oplus \mathcal{X}^\perp$ și definim extensia lui A la $\mathcal{H} = \mathcal{X} \oplus \mathcal{X}^\perp$ prin $\tilde{A} = A \oplus 0$. Corespondența $A \rightarrow \tilde{A}$ este injectivă și liniară, în plus dacă $B : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$ este un alt operator și produsul AB este definit (i. e. $B(\mathcal{X}) \subset \mathcal{X}$), atunci $\widetilde{AB} = \tilde{A}\tilde{B}$. Acest lucru permite să înțelegem prin \tilde{A} și să notăm cu A fie operatorul $A : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$, fie extensia sa $\tilde{A} = A \oplus 0 : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.

În cazul nostru identificăm spațiile hilbert $\mathcal{H}_{1,2}, \mathcal{H}_S$ cu subspațiile corepunzătoare din $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_2$ și, după caz, operatorii $h_1, R_1(z)$ vor fi înțeleși fie ca operatori în \mathcal{H}_1 , fie ca operatori în \mathcal{H} . Același lucru este presupus pentru h_1, h_S etc.

Pentru z în mulțimea rezolventă a lui h sau h_i notăm:

$$R(z) = (h - z)^{-1}, \quad R_i(z) = (h_i - z)^{-1} \quad (i = 1, 2). \quad (3.31)$$

Notăm cu $\mathcal{H}_{ac}(h_0)$ sau \mathcal{H}_{ac}^0 subspațiul $\mathcal{H}_1 \oplus 0 \oplus \mathcal{H}_2 \subset \mathcal{H}$, conform ipotezei **A3** acesta este subspațiul de absolut continuitate al lui h_0 . Definim $R_{ac}^0(z) : \mathcal{H}_{ac}(h_0) \rightarrow \mathcal{H}_{ac}(h_0)$, și $\tau : \mathcal{H}_{ac}(h_0) \rightarrow \mathcal{H}_S$ prin

$$R_{ac}^0(z) = R_1(z) \oplus R_2(z), \quad \tau(f_1 \oplus f_2) = \tau_1 f_1 + \tau_2 f_2. \quad (3.32)$$

Evident, conform celor spuse mai înainte, $R_{ac}^0(z)$ și τ notează deasemenea extensiile $R_1(z) \oplus 0 \oplus R_2(z)$, respectiv $\tau_1 \oplus 0 \oplus \tau_2$ la $\mathcal{H}_1 \oplus 0 \oplus \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}$, etc.

Descompunerea spectrală a lui h se bazează pe găsirea unei reprezentări adecvate pentru rezolventa $R(z)$. Folosim o variantă a metodei Feshbach, cu avantajul că perturbația v fiind de rang finit, se poate exprima seria de perturbație printr-o formulă închisă.

Avem de găsit $f = f_1 \oplus f_S \oplus f_2$ din sistemul de ecuații

$$\begin{cases} (h_1 - z)f_1 + \tau_1^* f_S = g_1 \\ \tau_1 f_1 + (h_S - z)f_S + \tau_2 f_2 = g_S \\ \tau_2^* f_S + (h_2 - z)f_2 = g_2, \end{cases} \quad (3.33)$$

unde $g = g_1 \oplus g_S \oplus g_2 \in \mathcal{H}$ este arbitrar.

Dacă $z \in \mathbb{C} \setminus (I_1 \cup I_2)$, din prima și a treia ecuație (3.33) se obțin f_1, f_2 în funcție de f_S :

$$f_1 = R_1(z)(g_1 - \tau_1^* f_S), \quad f_2 = R_2(z)(g_2 - \tau_2^* f_S), \quad (3.34)$$

iar ecuația a doua devine

$$(h_{ef}(z) - z)f_S = Q(z)g, \quad (3.35)$$

unde $h_{ef}(z) : \mathcal{H}_S \rightarrow \mathcal{H}_S$ și $Q(z) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_S$ sunt definiți prin:

$$\begin{aligned} h_{ef}(z) &= h_S - \tau_1 R_1(z) \tau_1^* - \tau_2 R_2(z) \tau_2^* = h_S - \tau R_{ac}^0(z) \tau^*, \\ Q(z) &= P_S - \tau R_{ac}^0(z), \end{aligned} \quad (3.36)$$

și P_S este proiectorul ortogonal pe \mathcal{H}_S .

Să observăm că $h_{ef}(z)$ este definit pe intersecția rezolventelor operatorilor h_1, h_2 și pentru $z \in \rho(h_1) \cap \rho(h_2) = \mathbb{C} \setminus (I_1 \cup I_2)$ satisface relația $h_{ef}(z)^* = h_{ef}(\bar{z})$. Ca urmare avem

$$\Re h_{ef}(z) = \Re h_{ef}(\bar{z}), \quad \Im h_{ef}(z) = -\Im h_{ef}(\bar{z}). \quad (3.37)$$

Condiția **A3** permite definirea lui h_{ef} pentru $x \in I_1 \cup I_2$ prin $h_{ef}(x + i0) = \lim_{y \searrow 0} h_{ef}(x + iy)$

Ori de câte ori $h_{ef}(z) - z$ este inversabil, ecuația (3.35) are soluția unică

$$f_S = R_{ef}(z)Q(z)g, \quad (3.38)$$

unde am notat $R_{ef}(z) = (h_{ef}(z) - z)^{-1}$.

Cu f_S obținut din ecuația (3.38) și cu f_1, f_2 determinați în funcție de f_S de ecuațiile (3.34), avem

$$\begin{aligned} f = f_1 \oplus f_S \oplus f_2 &= \begin{cases} R_1(z)g_1 - R_1(z)\tau_1^* R_{ef}(z)Q(z)g \\ R_{ef}(z)Q(z)g \\ R_2(z)g_2 - R_2(z)\tau_2^* R_{ef}(z)Q(z)g \end{cases} \\ &= R_{ac}^0(z)g + (-R_{ac}^0(z)\tau^* + P_S)R_{ef}(z)Q(z)g \end{aligned}$$

Cum $Q(\bar{z})^* = (P_S - \tau R_{ac}^0(\bar{z}))^* = P_S - R_{ac}^0(z)\tau^*$, putem scrie soluția sistemului (3.33) în forma compactă

$$f = (R_{ac}^0(z) + Q(\bar{z})^* R_{ef}(z)Q(z))g.$$

Deoarece spectrul absolut continuu rămîne invariant la o perturbație de rang finit [18], am demonstrat următoarea leamnă.

Lema 3.1 *Mulțimea rezolventă a operatorului h este*

$$\rho(h) = \{z \in \mathbb{C} \setminus (I_1 \cup I_2) : \ker(h_{ef}(z) - z) = \{0\}\},$$

iar pentru $z \in \rho(h)$ rezolventa operatorului h are expresia

$$R(z) = R_{ac}^0(z) + Q(\bar{z})^* R_{ef}(z) Q(z). \quad (3.39)$$

În continuare ne ocupăm de localizarea spectrului punctual σ_p al operatorului h .

Fie $z \in \sigma_p(h)$, $f = f_1 \oplus f_S \oplus f_2 \neq 0$ este un vector propriu al operatorului h cu valoarea proprie z dacă și numai dacă, f este o soluție a ecuației (3.33) cu $g = 0$. Distingem mai multe cazuri.

1. $\tau_i^* f_S = 0$ pentru $i = 1, 2$.

Atunci avem $(h_i - z)f_i = 0$, $i = 1, 2$, și deoarece h_i nu are spectru punctual, rezultă $f_i = 0$. Ecuația (3.33) arată că $z \in \sigma_p(h_S)$ și $f_S \in \ker \tau_i^*$ este vectorul propriu corespunzător. Reciproc dacă $f_S \in \ker \tau_i^*$ este un vector propriu pentru h_S , atunci $0 \oplus f_S \oplus 0$ este un vector propriu pentru h cu valoarea proprie z .

Deci orice vector propriu al lui h cu $\tau_i^* f_S = 0$ este de forma $0 \oplus f_S \oplus 0$ cu f_S vector propriu pentru h_S cu aceeași valoare proprie. Reciproc, dacă f_S este un vector propriu al lui h_S cu $\tau_i^* f_S = 0$ atunci $0 \oplus f_S \oplus 0$ este vector propriu al lui h pentru aceeași valoare proprie.

2. $\tau_i^* f_S \neq 0$ pentru cel puțin un i .

2a) presupunem mai întâi că $z \notin I_1 \cup I_2$. În acest caz există rezolventele $R_{1,2}(z)$ și ecuația (3.35) arată că $f_S \neq 0$ este vector propriu pentru $h_{ef}(z)$ cu valoarea proprie z . Reciproc, dacă $f_S \neq 0$ și $f_S \in \ker(h_{ef}(z) - z)$, atunci $Q(\bar{z})^* f_S$ este vector propriu al lui h cu valoarea proprie z .

2b) fie acum $z = x \in \text{int}(I_1 \cup I_2)$. Fie $f = f_1 \oplus f_S \oplus f_2 \neq 0$ un vector propriu al lui h cu valoarea proprie x . Atunci f satisface ecuația (3.33) cu $g = 0$, care poate fi rescrisă în forma

$$\begin{cases} (h_1 - x - iy)f_1 + \tau_1^* f_S & = -iyf_1 \\ \tau_1 f_1 + (h_S - x)f_S + \tau_2 f_2 & = 0 \\ \tau_2^* f_S + (h_2 - x - iy)f_2 & = -iyf_2. \end{cases} \quad (3.40)$$

Din prima și ultima ecuație se exprimă f_i , $i = 1, 2$

$$f_i = -iyR_i(x + iy)f_i - R_i(x + iy)\tau_i^* f_S.$$

Introduse în ecuația secundă conduc la

$$(h_{ef}(x + iy) - x)f_S = iy[\tau_1 R_1(x + iy)f_1 + \tau_2 R_2(x + iy)f_2],$$

și înmulțind scalar cu f_S avem

$$\langle f_S, (h_{ef}(x + iy) - x)f_S \rangle = iy \langle f_S, \tau_1 R_1(x + iy)f_1 + \tau_2 R_2(x + iy)f_2 \rangle. \quad (3.41)$$

Din ecuația (3.33) avem $\tau_i^* f_S = -(h_i - x)f_i$ și termenii membrului drept se transformă astfel

$$\begin{aligned} iy \langle f_S, \tau_i R_i(x + iy)f_i \rangle &= \\ iy \langle \tau_i^* f_S, R_i(x + iy)f_i \rangle &= -iy \langle (h_i - x)f_i, R_i(x + iy)f_i \rangle = \\ -iy \langle (h_i - x + iy)f_i, R_i(x + iy)f_i \rangle &- iy \langle -iyf_i, R_i(x + iy)f_i \rangle = \\ -iy |f_i|^2 + y^2 \langle f_i, R_i(x + iy)f_i \rangle. \end{aligned}$$

Ecuația (3.41) devine

$$\langle f_S, (h_{ef}(x + iy) - x)f_S \rangle = \sum_{i=1}^2 \{-iy |f_i|^2 + y^2 \langle f_i, R_i(x + iy)f_i \rangle\},$$

și egalitatea părților imaginare ne conduce la următoarea ecuație

$$-\Im \left\langle f_S, \left(\sum_{i=1}^2 \tau_i R_i(x + iy) \tau_i^* \right) f_S \right\rangle = \sum_{i=1}^2 \{-y |f_i|^2 + y^2 \Im \langle f_i, R_i(x + iy)f_i \rangle\}$$

Deoarece $|R_i(x + iy)| = 1/y$, rezultă că în limita $y \searrow 0$, membrul drept al egalității de mai sus este egal cu 0. Pe de altă parte, în virtutea condiției **A.3**, limita $y \searrow 0$ a membrului stîng al aceleiași egalități este strict pozitivă. Contradicția obținută demonstrează că h nu are valori proprii în $\text{int}(I_1 \cup I_2)$. In concluzie:

Lema 3.2 Fie $e^- = \min\{e_1^-, e_2^-\}$ și $e^+ = \max\{e_1^+, e_2^+\}$. $x \in \mathbb{R}$ face parte din spectrul punctual al operatorului h dacă este îndeplinită una din condițiile următoare:

1) există $f_S \neq 0$ cu $(h_S - x)f_S = 0$ și $f_S \in \ker \tau_1^* \cap \ker \tau_2^*$, în acest caz $0 \oplus f_S \oplus 0$ este vector propriu cu valoarea proprie x

2) $x \in (-\infty, e^-) \cup (e^+, \infty)$ și există $f_S \neq 0$ cu $(h_{ef}(x) - x)f_S = 0$, atunci $Q(\bar{z})^* f_S$ este vector propriu cu valoarea proprie x

3) $x \in \{e^-, e^+\}$, există $f_S \neq 0$ cu $(h_{ef}(x) - x)f_S = 0$ și $\lim_{x' \rightarrow x} |Q(x')^* f_S| < \infty$, în acest caz $\lim_{x' \rightarrow x} Q(x')^* f_S$ este vector propriu pentru valoarea proprie x .

Verificarea condițiilor 1) și 3) depinde puternic de model, pentru condiția 2) se poate da un criteriu util.

Considerăm familia de operatori autoadjuncți $\{h_{ef}(x); x \in (-\infty, e^-)\}$, fie $\lambda_1(x) \leq \dots \leq \lambda_n(x)$ valorile sale proprii și $\psi_S^{(1)}(x), \dots, \psi_S^{(n)}(x)$ funcțiile proprii corespunzătoare. Condiția 2) din lema este echivalentă cu existența unei soluții a ecuației $\lambda_k(x) = x$ pentru un $k = 1, \dots, n$. Cum $h_{ef}(x)$ este o funcție descrescătoare pe intervalul $(-\infty, e^-)$, $\lambda_k(x)$ sunt funcții descrescătoare pe același interval și ecuația $\lambda_k(x) = x$ are o soluție e_k^- dacă și numai dacă $\lim_{x \nearrow e^-} \lambda_k(x) < e^-$. În acest caz, conform lemei anterioare, e_k^- este valoare proprie a lui h și $\psi_S^{(k)}(e_k^-)$ se completează la un vector propriu. La fel se procedează pentru intervalul (e^+, ∞) . Obținem următoarea caracterizare a nucleului $\ker(h_{ef}(x) - x)$:

Lema 3.3 Fie $\lambda_1(x) \leq \dots \leq \lambda_n(x)$ valorile proprii ale lui $h_{ef}(x)$, $x \in (-\infty, e^-) \cup (e^+, \infty)$. $\ker(h_{ef}(e) - e) \neq 0$ dacă și numai dacă e satisface ecuația $\lambda_k(x) = x$, pentru un k . Ecuația $\lambda_k(x) = x$, are o soluție în $(-\infty, e^-)$ dacă și numai dacă $\lambda_k(e^- - 0) < e^-$ și are o soluție în (e^+, ∞) dacă și numai dacă $\lambda_k(e^+ + 0) < e^+$

Să arătăm în final că modelul considerat îndeplinește condițiile **A1-A3**. Condițiile **A1** și **A2** sunt evidente. În cazul nostru, vezi (3.7), elementele nenule ale operatorilor τ_1, τ_2 sunt $(\tau_1)_{1, \alpha_1} = (\tau_2)_{n, \alpha_2} = t$ și avem

$$(\tau_1 R_1(e + i\varepsilon) \tau_1^*)_{i,j} = t^2 \delta_{i,1} \delta_{j,1} R_1(e + i\varepsilon, \alpha_1, \alpha_1) \stackrel{\text{not}}{=} t^2 g_1(e + i\varepsilon).$$

Dacă $\Lambda_1 = \mathbb{Z}^{d_1}$, R_1 este dat de (3.15) și deci

$$g_1(e + i\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{B^d} \frac{1}{\omega(k) - z} dk.$$

Cu (3.23), (3.19) obținem că există $g_1(e + i0)$ și că

$$\Im g_1(e + i0) = \pi \hat{\mu}(e, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{d-1}} \int_{\omega(k)=e} d\mu_e(k) > 0.$$

Dacă $\Lambda_1 = \mathbb{Z}^{d_1-1} \times \mathbb{Z}_+$ avem

$$g_1(e + i\varepsilon) = \frac{4}{(2\pi)^d} \int_{B^d} \frac{\sin^2(k_d)}{\omega(k) - z} dk$$

și procedînd analog avem

$$\Im g_1(e + i0) = \pi \hat{\mu}(e, 0) = \frac{4}{(2\pi)^{d-1}} \int_{\omega(k)=e} \sin^2(k_d) d\mu_e(k) > 0.$$

În sfîrșit, funcțiile proprii (3.29) ale lui h_S satisfac

$$\psi_m(1) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin(m\pi/(n+1)) \neq 0, \quad m \in \{1, 2, \dots, n\},$$

și concludem că h nu are valori proprii în $(0, 2d)$.

4 CONSTRUCTIA NESS

4.1 Exprimarea NESS prin operatorii Möller

După cum am descris anterior pînă la momentul $t = 0$ rezervoarele $\mathcal{R}_{1,2}$ și firul \mathcal{S} nu interacționează între ele, i.e. hamiltonianul $h_0 = h_1 \oplus h_S \oplus h_2$ este sumă directă de operatori care comută între ei. Starea sistemului la $t = 0$ este dată de o matrice densitate de forma

$$\rho^0 = \rho_1^0 \oplus \rho_S^0 \oplus \rho_2^0 \quad (4.1)$$

unde $\rho_{1,2}, \rho_S$ sunt alese astfel încît starea cuasiliberă determinată de ρ^0 să fie invariantă la evoluția (2.44) dată de hamiltonianul h_0 , i.e.

$$\rho^0 = e^{-ith_0} \rho^0 e^{ith_0}. \quad (4.2)$$

Pentru rezervoare, ca pentru orice gaz fermi liber, există pentru orice valori $\beta_{1,2}$ ale temperaturii și $\mu_{1,2}$ ale potențialului chimic, stări unice de echilibru. Acestea sunt stări cuasilibere cu matricele de densitate $f_{\beta_{1,2}, \mu_{1,2}} = f_{\beta, \mu}(h_{1,2})$ unde $f_{\beta, \mu}$ este funcția fermi-dirac

$$f_{\beta, \mu}(x) = \frac{1}{1 + e^{\beta(x - \mu)}}. \quad (4.3)$$

Vom lua ca stări inițiale pentru rezervoare stările de echilibru determinate de matricele densitate $\rho_{1,2}^0 = f_{\beta_{1,2}, \mu_{1,2}}(h_{1,2})$. Pentru firul \mathcal{S} starea inițială va fi dată de o funcție oarecare de h_S , i.e. $\rho_S^0 = f(h_S)$, vom permite și $f = 0$, fiind interesant în ce măsură mediile locale pe fir depind de starea sa inițială. Cu această alegere pentru ρ^0 , h_0 comută cu ρ^0 și relația (4.2) este îndeplinită, astfel starea determinată de ρ^0 este invariantă la evoluția α^t generată de h_0 .

La momentul $t = 0$ rezervoarele și firul cuantic sunt cuplate prin hamiltonianul de tunelare (3.7) și pentru $t > 0$ starea sistemului este dată de hamiltonianul $h = h_0 + v$ prin intermediul matricei de densitate ρ^t determinată de ecuația (2.44):

$$\rho^t = e^{-ith} \rho^0 e^{ith}. \quad (4.4)$$

Pentru determinarea stării staționare ne interesează limita $t \rightarrow \infty$ a matricei densității ρ^t . În virtutea relației (4.2) ρ^t se poate scrie ca

$$\rho^t = e^{-ith} e^{ith_0} \rho^0 e^{-ith_0} e^{ith}, \quad (4.5)$$

formă ce pune în evidență operatorii Möller

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{ith} e^{-ith_0}. \quad (4.6)$$

Conform teoremei Kato-Rosenblum [18],[19] pentru perturbații $v = h - h_0$ de clasa urmei (în cazul nostru v este chiar de rang finit) operatorii Ω_{\pm} există pe subspațiul de absolută continuitate $\mathcal{H}_1 \oplus 0 \oplus \mathcal{H}_2$ al hamiltonianului h_0 și imaginile sunt subspațiul de absolută continuitate $\mathcal{H}_{ac}(h)$ al lui h (Ω_{\pm} sunt compleți) .

Reamintim că am notat cu $P_{ac}(h_0)$ (sau P_{ac}^0) proiectorul pe subspațiul de absolută continuitate $\mathcal{H}_1 \oplus 0 \oplus \mathcal{H}_2$ al operatorului h_0 și cu P_S proiectorul pe $0 \oplus \mathcal{H}_S \oplus 0$, subspațiul generat de vectorii proprii ai lui h_0 . Analog notăm cu $P_{ac}(h)$ (sau P_{ac}) , $P_p(h)$ proiectorii ortogonali pe $\mathcal{H}_{ac}(h)$ și respectiv pe subspațiul $\mathcal{H}_p(h)$ generat de vectorii proprii ai lui h . Astfel teorema Kato-Rosenblum ne asigură de existența limitelor (în sens tare)

$$\Omega_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{ith} e^{-ith_0} P_{ac}(h_0), \quad (4.7)$$

$$\Omega_{\pm}^* = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{ith_0} e^{-ith} P_{ac}(h). \quad (4.8)$$

De asemenea avem $\Omega_{\pm}(\mathcal{H}_{ac}(h_0)) = \mathcal{H}_{ac}(h)$,

$$\Omega_{\pm}(\mathcal{H}_{ac}(h_0)) = \mathcal{H}_{ac}(h), \quad \Omega_{\pm}^*(\mathcal{H}_{ac}(h)) = \mathcal{H}_{ac}(h_0).$$

În fapt Ω_{\pm} sunt operatori izometrici avînd suportul drept $\mathcal{H}_{ac}(h_0)$ și suportul stîng $\mathcal{H}_{ac}(h)$, analog Ω_{\pm}^* sunt izometrii între $\mathcal{H}_{ac}(h)$ și $\mathcal{H}_{ac}(h_0)$, inversele izometriilor Ω_{\pm} .

Conform relației (4.5), pentru a determina starea la $t \rightarrow \infty$ ne interesează limita

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho^t = \lim_{t \rightarrow -\infty} (e^{ith} e^{-ith_0}) \rho^0 (e^{ith} e^{-ith_0})^*. \quad (4.9)$$

Relațiile (4.7) și (4.8) ne asigură că această limită există pe $\mathcal{H}_{ac}(h)$. În acest caz putem defini starea staționară la $t \rightarrow \infty$ prin

$$\rho^{\infty} P_{ac} = \lim_{t \rightarrow \infty} \rho^t P_{ac} = \Omega_- \rho^0 \Omega_-^* \quad (4.10)$$

Problema este că pe $\mathcal{H}_p(h)$ limita (4.9) nu există. Din această cauză se adoptă o definiție mai slabă pentru ρ^{∞} , cerîndu-se numai convergența

elementelor de matrice a mediei temporale a evoluției $\{\rho^t\}_{t \geq 0}$, adică existența limitei

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} (1/T) \int_0^T \langle g, \rho^t f \rangle dt, \quad (4.11)$$

pentru orice pereche de vectori f, g din \mathcal{H} . Altfel spus se definește ρ^∞ ca limită slabă

$$\rho^\infty = w - \lim_{T \rightarrow +\infty} (1/T) \int_0^T \rho^t dt. \quad (4.12)$$

Deoarece pe $\mathcal{H}_{ac}(h)$ există limita (4.10), este evident că pentru orice pereche $f, g \in \mathcal{H}_{ac}(h)$ există limita (4.11) și este egală cu $\langle g, \Omega_- \rho^0 \Omega_-^* f \rangle$, astfel că definiția (4.12) este consistentă pe $\mathcal{H}_{ac}(h)$ cu definiția anterioară (4.10).

Acum, pe de o parte, dacă f este un vector propriu al lui h cu valoarea proprie e și $g \in \mathcal{H}_{ac}(h)$, avem

$$\langle g, \rho_t f \rangle = \langle g, e^{-ith} \rho^0 e^{ith} f \rangle = \left\langle g, \int_{\sigma(h)} e^{-it(x-e)} dE(x) \rho^0 f \right\rangle$$

unde $E(x)$ este măsura spectrală a operatorului h . Cum g este în subspațiul de absolută continuitate al operatorului h avem

$$\langle g, e^{-ith} \rho^0 e^{ith} f \rangle = \int_{\sigma_{ac}(h)} e^{-it(x-e)} d \langle E_{ac}(x) g, \rho^0 f \rangle$$

cu funcția $x \rightarrow \langle E_{ac}(x) g, \rho^0 f \rangle$ integrabilă și absolut continuă, în virtutea lemei Riemann-Lebesgue avem

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \langle g, e^{-ith} \rho^0 e^{ith} f \rangle = 0,$$

și evident limita (4.11) este zero. Cum $\mathcal{H}_p(h)$ este finit dimensional limita rămîne zero pentru orice $f \in \mathcal{H}_p(h)$

Pe de altă parte, dacă g este de asemenea un vector propriu al lui h cu valoarea proprie e' , avem

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} (1/T) \int_0^T \langle g, \rho^t f \rangle dt = \lim_{T \rightarrow +\infty} (1/T) \int_0^T e^{it(e-e')} \langle g, \rho^0 f \rangle dt = \delta_{e,e'} \langle g, \rho^0 f \rangle,$$

și în virtutea dimensiunii finite a lui $\mathcal{H}_p(h)$ limita de mai sus există pentru orice pereche $f, g \in \mathcal{H}_p(h)$. Astfel limita (4.11) există pentru orice $f, g \in \mathcal{H}$, și matricea ρ^∞ este corect definită de (4.12).

Fie ω^t starea cuasiliberă generată de ρ^t , i.e. $\omega^t(a^*(f)a(g)) = \langle g, \rho^t f \rangle$, concludem

Propozitia 4.1 *Pentru $A \in CAR(\mathcal{H})$ există limita*

$$\lim_{T \rightarrow +\infty} (1/T) \int_0^T \omega^t(A) dt = \omega^\infty(A) \quad (4.13)$$

și este starea cuasiliberă generată de matricea densitate

$$\rho^\infty = \Omega_- \rho^0 \Omega_-^* + \sum_{e \in \sigma_p(h)} P_e \rho^0 P_e, \quad (4.14)$$

unde P_e este proiectorul pe subspațiul propriu al valorii proprii e . Restricția lui ρ^∞ la $CAR(\mathcal{H}_{ac}(h))$ este starea cuasiliberă dată de matricea densitate $\Omega_- \rho^0 \Omega_-^*$ și avem

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \omega^t(A) = \omega^\infty(A), \quad A \in CAR(\mathcal{H}_{ac}(h)) \quad (4.15)$$

Observăm că matricea densitate ρ^∞ a stării staționare privită ca funcție de matricea densitate la $t = 0$, $\rho^\infty(\rho^0)$ este aditivă, mai mult dacă ρ', ρ'' și $\rho^0 = \alpha' \rho' + \alpha'' \rho''$ cu $\alpha', \alpha'' \geq 0$ sunt matrice densitate, atunci

$$\rho^\infty(\alpha' \rho' + \alpha'' \rho'') = \alpha' \rho^\infty(\rho') + \alpha'' \rho^\infty(\rho''). \quad (4.16)$$

În cazul nostru matricea ρ^0 este o sumă directă $\rho^0 = \rho_1^0 \oplus \rho_S^0 \oplus \rho_2^0$, astfel contribuția fiecărui termen la starea staționară este separată

$$\rho^\infty(\rho_1^0 \oplus \rho_S^0 \oplus \rho_2^0) = \rho^\infty(\rho_1^0) + \rho^\infty(\rho_S^0) + \rho^\infty(\rho_2^0),$$

și permite determinarea stării staționare pentru întregul sistem prin calculul separat al stărilor staționare pentru fiecare subsistem.

4.2 Exprimarea mediilor

Suntem interesați să găsim expresii explicite pentru mediile observabilelor locale cum ar fi numărul de particule $n_x = a_x^* a_x$ sau densitatea de energie pe un nod oarecare $x \in \Lambda$

$$e_x = da_x^* a_x - \frac{1}{4} \sum_{y, |x-y|=1} (a_x^* a_y + h.c), \quad d = d_1, d_2 \text{ or } 1,$$

prin urmare este suficient să avem expresia pentru funcția de două puncte în starea staționară de neechilibru

$$\omega_{stat}(a_x^* a_y) = (\delta_y, \rho_{stat} \delta_x) \quad (4.17)$$

În expresia (4.14) pentru ρ^∞ termenul secund, reprezentînd suma peste valorile proprii poate fi calculat folosind Lema 3.2 din secțiunea precedentă. Rămîne să determinăm contribuția spectrului absolut continuu la $(\delta_y, \rho_{stat} \delta_x)$. Fie $\psi_1(k, \cdot) \oplus 0 \oplus 0$ și $0 \oplus 0 \oplus \psi_2(k, \cdot)$ funcțiile proprii generalizate ale lui h_0 . Funcțiile proprii generalizate ale lui h se obțin din cele ale lui h_0 folosind relația cunoscută din teoria împrăstierii [19]

$$\tilde{\psi}_1(k_1, \cdot) = \Omega_-(\psi_1(k_1, \cdot) \oplus 0 \oplus 0) = -\lim_{\varepsilon \searrow 0} i\varepsilon R(\omega_1(k_1) + i\varepsilon)(\psi_1(k_1, \cdot) \oplus 0 \oplus 0),$$

respectiv

$$\tilde{\psi}_2(k_2, \cdot) = \Omega_-(0 \oplus 0 \oplus \psi_2(k_2, \cdot)) = -\lim_{\varepsilon \searrow 0} i\varepsilon R(\omega_2(k_2) + i\varepsilon)(0 \oplus 0 \oplus \psi_2(k_2, \cdot)),$$

aici ω_1, ω_2 sunt legile de dispersie a lui h_1, h_2 , iar R este rezolventa lui h dată de (3.39).

Se obține în limita $\varepsilon \searrow 0$

$$\tilde{\psi}_1(k_1, \cdot) = \begin{cases} R_1(\omega(k_1))vR_{ef}(\omega(k_1))v\psi_1(k_1, \cdot)(\cdot) + \psi_1(k_1, \cdot) \\ -R_{ef}(\omega(k_1))v\psi_1(k_1, \cdot)(\cdot) \\ R_2(\omega(k_1))vR_{ef}(\omega(k_1))v\psi_1(k_1, \cdot)(\cdot) \end{cases} \quad (4.18)$$

și expresia analoagă pentru $\tilde{\psi}_2(k_2, \cdot)$

Dezvoltăm $\delta_x(\cdot)$ după funcțiile proprii ale lui h

$$\delta_x(\cdot) = \sum_{i=1}^2 \int dk_i \tilde{\psi}_i(k_i, \cdot) \bar{\tilde{\psi}}_i(k_i, x) + \sum_m \psi_m(\cdot) \bar{\psi}_m(x),$$

și deoarece $P_{ac}(h)\psi_m = 0$, vom avea

$$P_{ac}(h)\delta_x = \sum_{i=1}^2 \int dk_i \tilde{\psi}_i(k_i, \cdot) \bar{\tilde{\psi}}_i(k_i, x)$$

După cum am văzut mai sus Ω_- duce funcțiile proprii generalizate ale lui h_0 în cele ale lui h deci

$$\Omega_-^* \delta_x = \sum_{i=1}^2 \int dk_i \psi_i(k_i) \widetilde{\psi}_i(k_i, x)$$

și avem

$$(\delta_y, \Omega_- \rho^0 \Omega_-^* \delta_x) = \sum_{i=1}^2 \int dk_i dk'_i \widetilde{\psi}_i(k_i, y) (\psi_i(k_i), \rho_i^0 \psi_i(k'_i)) \widetilde{\psi}_i(k'_i, x).$$

Cum ρ_i^0 sunt funcții fermi de h_i , avem $(\psi_i(k), \rho_i^0 \psi_i(k')) = \delta_{k,k'} f_{\beta,\mu}(\omega(k))$ astfel că în final avem

$$(\delta_y, \Omega_- \rho^0 \Omega_-^* \delta_x) = \sum_{i=1}^2 \int dk_i \widetilde{\psi}_i(k_i, y) f_{\beta,\mu}(\omega(k_i)) \widetilde{\psi}_i(k_i, x). \quad (4.19)$$

Această ecuație împreună cu expresia funcțiilor proprii generalizate (4.18) permite calculul observabilelor locale de interes.

După cum se vede din (4.18), comportarea în x a funcției proprii generalizate $\widetilde{\psi}_1(k_1, x)$, este dată de comportarea rezolventei libere $R_1(\omega(k_1) + i0)(x, \alpha_1)$ (reamintim că α_1 este nodul din primul rezervor cuplat prin tunelare, $(\tau_1)_{1,\alpha_1} \neq 0$, analog α_2 pentru cel de al doilea rezervor) pentru x în primul rezervor, respectiv de $R_2(\omega(k_1) + i0)(x, \alpha_2)$ pentru x în al doilea rezervor. Dacă $d_{1,2}$ sunt dimensiunile rezervoarelor, avînd în vedere relațiile (3.21), (3.22) și (3.17), pentru funcția proprie generalizată $\widetilde{\psi}_1(k_1, x)$ se obține următoarea estimare

$$\widetilde{\psi}_1(k_1, x) = \begin{cases} O(1) & \text{pentru } d_1 = 1 \\ O(|x|^{-1/2}) & \text{pentru } d_2 \geq 2 \end{cases} \quad (4.20)$$

pentru x în primul rezervor,

$$\widetilde{\psi}_1(k_1, x) = \begin{cases} O(1) & \text{pentru } \omega(k_1) \in \sigma(h_2), \quad d_2 = 1 \\ O(|x|^{-1/2}) & \text{pentru } \omega(k_1) \in \sigma(h_2), \quad d_2 \geq 2 \\ O(e^{-\delta|x|}) & \text{pentru } \omega(k_1) \notin \sigma(h_2) \end{cases} \quad (4.21)$$

pentru x în al doilea rezervor ($\delta > 0$ este constanta din (3.17)).

Amplitudinea funcției generalizate $\tilde{\psi}_1(k_1, x)$ este dată de, vezi (4.18) $R_{ef}(\omega(k_1) + i0)_{1,1}$ pentru x în primul rezervor, respectiv $R_{ef}(\omega(k_1) + i0)_{n,1}$ pentru x în al doilea rezervor. După cum am arătat h_{ef} nu are valori proprii în $\sigma(h_1) \cup \sigma(h_2)$ și pentru tunelare t mică nu are chiar nici o valoare proprie, astfel $R_{ef}(\omega(k_1) + i0)$ este o matrice cu valori finite. Totuși valorile proprii ale lui h_S dau o structură de rezonanțe care se manifestă prin salturi ale amplitudinii funcției generalizate $\tilde{\psi}_1(k_1, x)$.

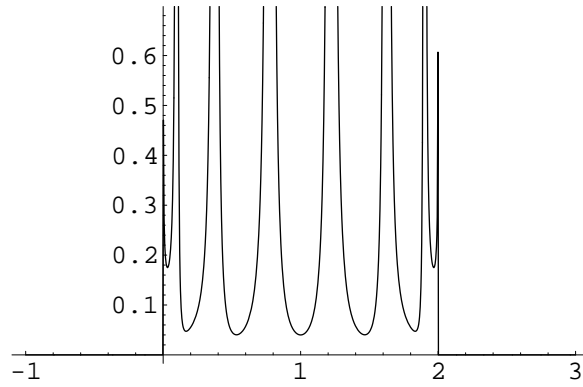


Figure 1: Partea imaginară a lui $R_{ef}(e + i0)_{1,1}$ ca funcție de e .

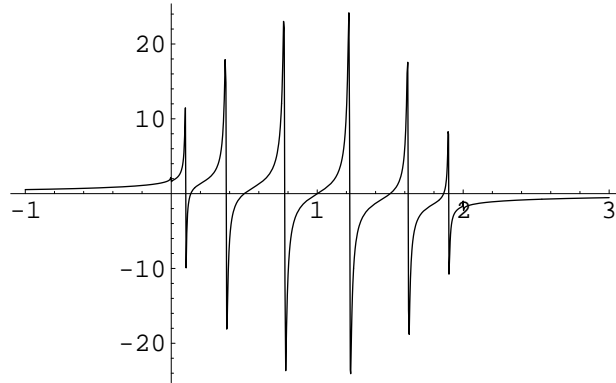


Figure 2: Partea reală a lui $R_{ef}(e + i0)_{1,1}$ ca funcție de e .

În figura 1 și 2 sunt reprezentate partea reală și imaginară a elementului

$R_{ef}(e+i0)_{1,1}$ pentru cazul cînd sistemul finit \mathcal{S} are $n = 6$ noduri, parametrul $e_g = 0$ și rezervoarele sunt infinite de dimensiune 1. Influența rezervoarelor se manifestă în h_{ef} prin elementele de matrice ale rezolventelor $\Im R_1(\omega(k_1) + i0)(\alpha_1, \alpha_1)$ și $\Im R_2(\omega(k_1) + i0)(\alpha_2, \alpha_2)$ și nu schimbă fundamental dependența lui $R_{ef}(e)$ de e , iar parametrul e_g are un efect de translație $e \rightarrow e + e_g$, astfel că figurile 1 și 2 dau o imagine corectă a cazului general.

4.3 Exemple

4.3.1 Corelațiile pentru rezervoare

Mai întii amintim proprietățile corelațiilor pentru rezervoare. După cum am spus considerăm două tipuri de rezervoare, în cazul unidimensional aceasta revine la $\Lambda = \mathbb{Z}$ (rezervor infinit) sau $\Lambda = \mathbb{Z}_+$ (rezervor semiinfinit). În ambele cazuri matricea densitate a stării de echilibru este determinată de funcția fermi, adică $\rho_{inf} = f_{\beta,\mu}(h_{\mathbb{Z}})$ unde $h_{\mathbb{Z}}$ este hamiltonianul (3.10) pentru $\Lambda = \mathbb{Z}$, respectiv $\rho_{semi} = f_{\beta,\mu}(h_{\mathbb{Z}_+})$ unde $h_{\mathbb{Z}_+}$ este hamiltonianul (3.10) pentru $\Lambda = \mathbb{Z}_+$.

Funcțiile proprii generalizate ale lui $h_{\mathbb{Z}}$ sunt $\{e^{ikx}/\sqrt{2\pi}\}_{k \in (-\pi, \pi]}$, astfel că matricea densitate ρ_{inf} este operator integral cu nucleul

$$\rho_{inf}(y, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ik(y-x)} f_{\beta,\mu}(\omega(k)) dk, \quad (4.22)$$

unde $x, y \in \mathbb{Z}$.

Corespunzător notăm cu ω_{inf} starea cuasiliberă determinată de ρ_{inf} , deci funcția de două puncte este $\omega_{inf}(a_x^* a_y) = tr(\rho_{inf} a_x^* a_y) = \langle \delta_y, \rho_{inf} \delta_x \rangle$, deci

$$\omega_{inf}(a_x^* a_y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ik(y-x)} f_{\beta,\mu}(\omega(k)) dk. \quad (4.23)$$

Deoarece pentru $\Lambda = \mathbb{Z}_+$, hamiltonianul $h_{\mathbb{Z}_+}$ are funcțiile proprii generalizate $\{\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{ikx}\}_{k \in [0, \pi)}$ nucleul integral al matricei densitate ρ_{semi} este

$$\rho_{semi}(y, x) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin(ky) \sin(kx) f_{\beta,\mu}(\omega(k)) dk, \quad (4.24)$$

iar starea cuasiliberă determinată de ρ_{semi} are funcția de două puncte

$$\omega_{semi}(a_x^* a_y) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \sin(ky) \sin(kx) f_{\beta, \mu}(\omega(k)) dk, \quad (4.25)$$

unde $x, y \in \mathbb{Z}_+ = \{1, 2, \dots\}$.

Este imediată relația dintre cele două funcții de corelație

$$\omega_{inf}(a_x^* a_y) = \omega_{semi}(a_x^* a_y) + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(k(x+y)) f_{\beta, \mu}(\omega(k)) dk, \quad (4.26)$$

pentru noduri $x, y \in \mathbb{Z}_+$.

Trebuie să observăm că $\omega_{inf}(a_x^* a_y)$ cade exponențial cu $|x-y|$. Într-adevăr, în expresia (4.23) integrantul este funcție analitică și periodică de k și avem un $c = c(\beta, \mu)$ astfel că integrantul nu are singularități pentru $|\Im k| \leq c$. Pentru $y-x > 0$, integrala se mută în semiplanul superior pe segmentul $[-\pi + ic, \pi + ic]$, respectiv pe segmentul $[-\pi - ic, \pi - ic]$ din semiplanul inferior pentru $y-x < 0$, astfel că

$$|\omega_{inf}(a_x^* a_y)| \leq C(\beta, \mu) e^{-c(\beta, \mu)|x-y|}. \quad (4.27)$$

Deoarece $\sin(ky) \sin(kx)$ este o combinație liniară a exponențialelor $e^{\pm ik(y \pm x)}$, vom avea de asemenea

$$|\omega_{semi}(a_x^* a_y)| \leq C(\beta, \mu) e^{-c(\beta, \mu)|x-y|}, \quad (4.28)$$

unde s-a avut în vedere că $x, y \geq 1$.

Absolut analog din (4.26) se obține

$$|\omega_{inf}(a_x^* a_y) - \omega_{semi}(a_x^* a_y)| \leq C(\beta, \mu) e^{-c(\beta, \mu)(x+y)}, \quad (4.29)$$

pentru noduri x, y în firul semiinfinit.

În cazul firului infinit densitatea de particule pe nod $\omega_{inf}(a_x^* a_x) = \omega_{inf}(a_{x+y}^* a_{x+y})$ este constantă și definește densitatea de particule a sistemului la temperatura inversă β și potențial chimic μ

$$n(\beta, \mu) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f_{\beta, \mu}(\omega(k)) dk. \quad (4.30)$$

Densitatea $n(\beta, \mu)$ este strict crescătoare de μ și $\lim_{\mu \rightarrow -\infty} n(\beta, \mu) = 0$, respectiv $\lim_{\mu \rightarrow \infty} n(\beta, \mu) = 1$, astfel pentru orice $n \in (0, 1)$ și β fixat, ecuația $n(\beta, \mu) = n$ are o singură soluție $\mu(\beta, n)$ ce ne dă potențialul chimic care la β fixat asigură densitatea n în sistem. Evident, la β fixat, $\mu(\beta, n)$ este crescătoare de n , dar la n fixat nu este funcție monoton crescătoare de β , în fig.3 se vede dependența tipică a potențialului chimic de β la densitate constantă.

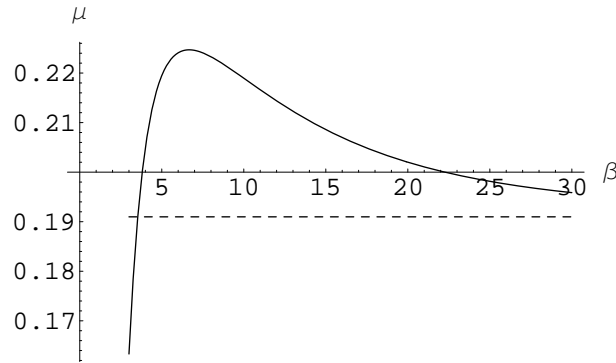


Figure 3: μ ca funcție de β la $n = .2$

În modelul nostru impulsul fermi și energia fermi sunt:

$$k_F = \pi n, \quad e_F = 2 \sin \frac{\pi n}{2}. \quad (4.31)$$

Așa cum este normal, la temperaturi mici potențialul chimic tinde la energia fermi: $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mu(\beta, n) = e_F(n)$, dar avem două regiuni de temperaturi pentru care potențialul chimic se află în vecinătatea lui e_F . În situația exemplificată în figură, pentru β în jurul lui $\beta = 3.5$ și pentru $\beta > 30$ avem $\mu \simeq e_F(.2) = 0.191$, dar în cele două regiuni situația fizică este diferită: în jurul lui $\beta = 3.5$ gazul fermi este aproape un gaz clasic pe când pentru $\beta > 30$ gazul este degenerat.

În cazul firului semiinfinit densitatea de particule pe nod $n_x = \omega_{semi}(a_x^* a_x)$ nu mai este constantă, dar din (4.29) avem

$$|n_x - n| \leq C(\beta, \mu) e^{-c(\beta, \mu)x},$$

astfel că n_x se apropie rapid de valoarea densității pentru firul infinit. Rapiditatea cu care n_x se apropie de n (la n fixat) depinde de regim: pentru β

Table 1: $1 - n_x/n$ la densitate $n = .4$

nodul	1	2	3	4	5	6	
$1 - n_x/n$	$5 \cdot 10^{-2}$	$-6.4 \cdot 10^{-3}$	$6.8 \cdot 10^{-4}$	$-6 \cdot 10^{-5}$	$5.2 \cdot 10^{-6}$	$-3.8 \cdot 10^{-7}$	$\beta = 2$
$1 - n_x/n$.179	-.088	.033	-.0097	.0017	$1.1 \cdot 10^{-4}$	$\beta = 6$
$1 - n_x/n$.226	-.166	.095	-.037	.0016	.0135	$\beta = 15$

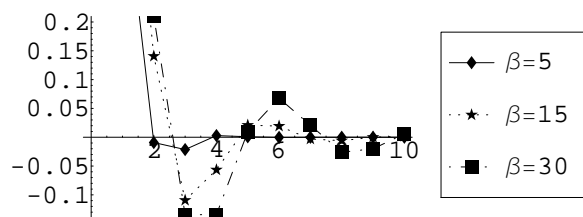


Figure 4: $1 - n_x/n$ la densitate $n = .4$

mare (cazul degenerat) avem valori mult mai mari pentru $(n - n_x)/n$ decît pentru β mic cînd gazul se comportă clasic. Vezi tabelul 1 pentru densitatea $n = .4$ și fig.4 pentru $n = .2$.

În cazul rezervoarelor cu dimensiune > 1 , pentru comportarea corelațiilor $\omega_{inf}(a_x^* a_y)$, $\omega_{semi}(a_x^* a_y)$ se obțin, folosind același procedeu de mutare a integralei după k în complex, formule similare cu (4.27), (4.28) și (4.29).

4.3.2 Cuplaj între rezervoare unidimensionale

După cum am remarcat în finalul secțiunii 4.1, pentru calculul matricei densității ρ^∞ a stării staționare de neechilibru este suficient să considerăm, pe rînd, diferită de zero doar cîte una din matricele densitate inițiale ρ_1^0 , ρ_2^0 sau ρ_S^0 ale subsistemelor decuplate. Vom considera că primul rezervor se află inițial în echilibru la temperatură β și potențial chimic μ i.e. conform cu (4.3) $\rho_1^0 = f_{\beta,\mu}(h_1)$, iar pentru al doilea rezervor și pentru proba \mathcal{S} luăm $\rho_2^0 = 0$, $\rho_S^0 = 0$. Astfel în formula (4.19) intervine numai funcția proprie generalizată $\psi_1(k_1, \cdot)$, și dacă presupunem în plus că tunelarea t este suficient de mică astfel încît nu avem valori proprii, atunci calculul matricei ρ^∞ și a corelațiilor se reduce la calculul funcției proprii generalizate $\tilde{\psi}_1(k_1, \cdot)$. Pentru cazul

rezervoarelor unidimensionale infinite expresia acesteia (4.18) devine

$$\tilde{\psi}_1(k_1, x) = \begin{cases} \frac{t^2}{\sqrt{2\pi}} R(e_1, x) R_{ef}(e_1)_{1,1} + \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} & x \text{ în primul rezervor} \\ -\frac{t}{\sqrt{2\pi}} R_{ef}(e_1)_{x,1} & x \text{ în probă} \\ \frac{t^2}{\sqrt{2\pi}} R(e_1, x) R_{ef}(e_1)_{n,1} & x \text{ în al doilea rezervor} \end{cases} \quad (4.32)$$

unde $e_1 = \omega(k_1)$ și $R(e, x)$ este, conform cu ecuația (3.22)

$$R(e + i0; x) = i \frac{e^{i\alpha x}}{\sqrt{e(2-e)}}, \quad \alpha = \arctan \frac{\sqrt{e(2-e)}}{1-e}.$$

În aceste condiții funcția de corelație de două puncte în starea NESS ρ^∞ capătă forma

$$\omega^\infty(a_x^* a_y) = \int_{-\pi}^{\pi} dk \tilde{\psi}_1(k, y) f_{\beta, \mu}(\omega(k)) \overline{\tilde{\psi}_1(k, x)}. \quad (4.33)$$

Ne interesează cum se modifică densitatea de particule pe nod, care are o expresie mult mai simplă de analizat

$$n_x = \omega^\infty(a_x^* a_x) = \int_{-\pi}^{\pi} dk \left| \tilde{\psi}_1(k, x) \right|^2 f_{\beta, \mu}(\omega(k)). \quad (4.34)$$

În figurile 5, 6 și 7 s-a reprezentat $\left| \tilde{\psi}_1(k, x) \right|^2$ ca funcție de k pentru nodurile: 1 din primul rezervor, 1 din proba \mathcal{S} și 1 din al doilea rezervor. Pentru comparație s-a reprezentat și modulul pătrat al funcției de undă neperturbate $|\psi_1(k, x)|^2 = 1/2\pi$. Proba are 6 noduri și $e_g = 0$. Se vede clar influența rezonanțelor asupra amplitudinii funcției proprii generalizate.

Variația densității de-a lungul sistemului este bruscă la trecerea dintr-un subsistem în altul dar este lină în interiorul fiecărui subsistem. Spre exemplu, la densitate inițială $n = .2$ a primului rezervor, situația este arătată în figura 8 pentru rezervorul 1 și în figura 9 pentru proba \mathcal{S} , densitatea de-a lungul rezervorului 2 este constantă, cu valoarea .001422.

După cum era de așteptat densitatea în primul rezervor crește pe măsură ce ne depărtăm de punctul de contact în concordanță cu faptul că prin nodul 0 avem un curent de particule dinspre rezervorul 1 spre rezervorul 2.

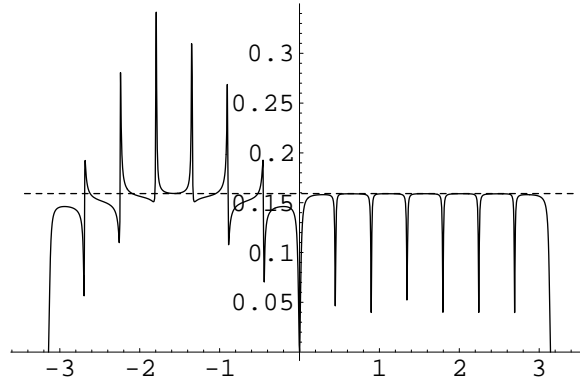


Figure 5: Modulul pătrat $|\tilde{\psi}_{11}(k, 1)|^2$ ca funcție de k .

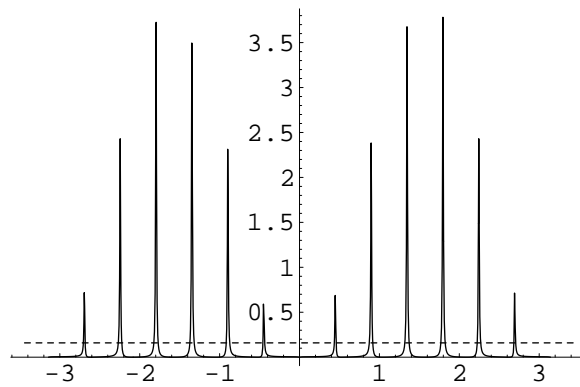


Figure 6: Modulul pătrat $|\tilde{\psi}_{1S}(k, 1)|^2$ ca funcție de k .

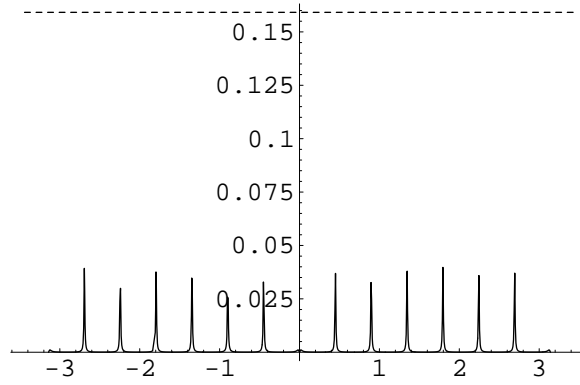


Figure 7: Modulul pătrat $|\tilde{\psi}_{12}(k, 1)|^2$ ca funcție de k .

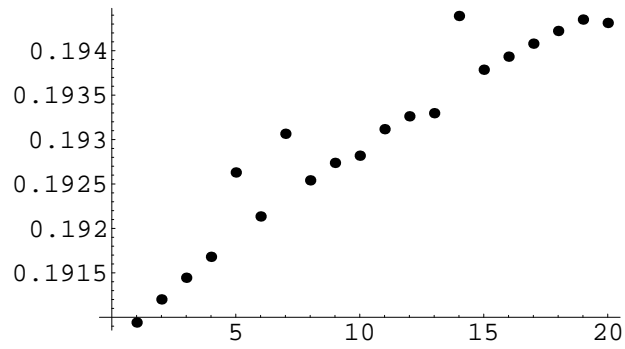


Figure 8: n_x în primul rezervor, densitatea inițială a acestuia fiind .2

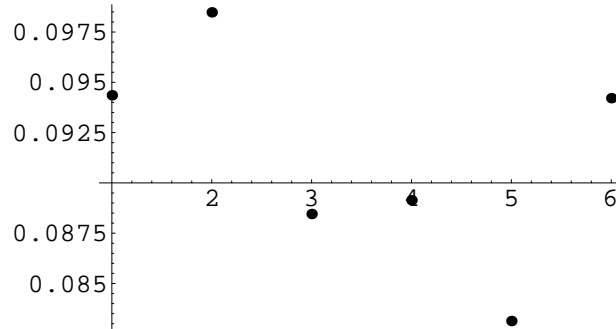


Figure 9: n_x în \mathcal{S} , densitatea inițială a rezervorului 1 fiind .2

Efectul de platou al rezonanțelor asupra densității se vede dacă suntem la temperaturi joase astfel ca potențialul chimic să fie aproape de nivelul fermi (distribuția fermi este apropiată de funcția treaptă) și variem parametrii cu păstrarea acestei condiții. La densitate inițială fixată în primul rezervor putem varia temperatura sau parametrul e_g . Prin variația lui β astfel încât gazul să rămână degenerat, potențialul chimic variază puțin și prinde putine rezonanțe, apoi cu scăderea lui β gazul se apropie de regimul clasic și se mediază pe mai multe rezonanțe, ceea ce duce la dispariția efectului de platou. În figura 10 este exemplificat acest fapt pentru densitate inițială a primului rezervor egală cu .2.

Mărind parametrul e_g la temperatură și densitate inițială a primului rezervor fixate se obține o scădere continuă a densității n_x pentru orice nod x din sistem. Variația în salturi a densității pentru nodurile din probă sau din rezervorul 2, se vede foarte clar dacă variem densitatea inițială n_∞ a rezervorului 1 la temperatură nulă, vezi figurile 11 și 12. De asemenea se vede ca efectul de platou nu are loc pentru densitățile nodurilor din rezervorul 1, în figura 13 se vede variația netedă a densității pentru nodurile 1 și 1000 din rezervorul 1.

Calcululele numerice efectuate pentru cazul cînd se consideră rezervoare cu dimensiuni ≥ 2 nu schimbă calitativ comportarea descrisă mai sus. În continuare densitățile pe nodurile probei nu interpolează lin între densitățile rezervoarelor și nu se poate vorbi de un profil care local ar putea fi de echilibru. Se regăsește întreaga structură găsită în cazul unidimensional, acest lucru

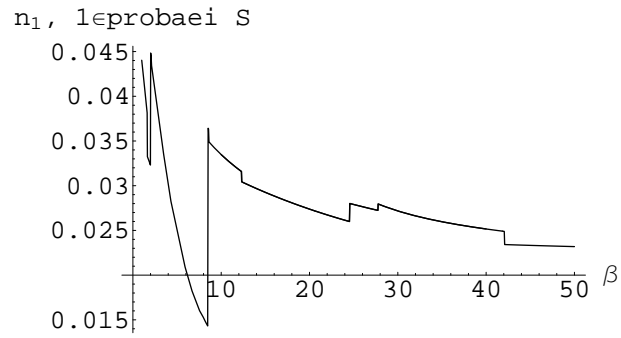


Figure 10: $n_1(\beta)$ din \mathcal{S} , la densitate .2 a rezervorului 1.

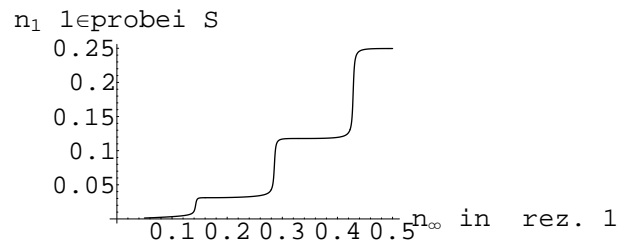


Figure 11: Densitatea $n_1(n_\infty)$ a nodului 1 din \mathcal{S} , la temperatură zero.

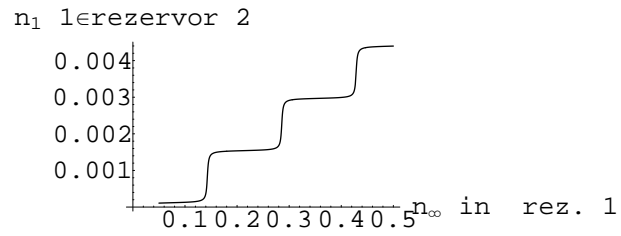


Figure 12: Densitatea $n_1(n_\infty)$ a nodului 1 din rezervorul 2, la temperatură zero.

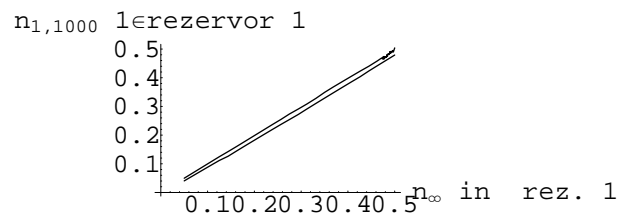


Figure 13: $n_1(n_\infty)$, $n_{1000}(n_\infty)$ a nodurilor 1 și 1000 din rezervorul 1, la temperatură zero.

se datorează faptului că mărimile sunt controlate în esență de $R_{ef}(z)$, iar aceasta depinde de valorile pe spectru ale rezolventelor rezervoarelor, valori care la rîndul lor nu prezintă modificări drastice pe spectrul absolut continuu $\sigma(h_1) \cup \sigma(h_2)$. Un fenomen studiat recent de noi [20] constă în interferența ce apare cînd rezervoarele se cuplează prin intermediul a două fire cuantice. Se studiază dependența densităților pe nodurile probelor și a curenților prin ele în funcție de lungimile probelor și de distanțele dintre punctele lor de contact, această dependență prezintă caracteristicile specifice fenomenului de interferență.

5 Spini clasici în aproximația câmpului mediu

5.1 Descrierea modelului

Metoda cimpului mediu este folosită adesea cind vrem sa obținem proprietățile termodinamice ale anumitor sisteme fizice. Pe scurt, această metodă constă în aproximarea hamiltonianului cu un hamiltonian de cimp mediu și în evaluarea exactă a problemei corespunzătoare de mecanică statistică pentru a obține mărimile termodinamice.

În acest capitol este prezentată o metodă originală dezvoltată în [21], metodă prin care se pot trata hamiltonienii feromagnetici pentru spini clasici pe rețea. Asadar sistemul finit constă din spini clasici $x_i \in R^d$ localizați pe nodurile i ale unei rețele finite $\Lambda \subset \mathbf{Z}^\nu$. În aproximația cimpului mediu fiecare spin are o interacție efectivă constantă cu toți ceilalți spini din rețea, constanta de cuplaj fiind corespunzător normată pentru a avea o densitate de energie finită. În aceste condiții geometria rețelei și dimensiunea ei (ν) sunt irelevante și hamiltonianul de cimp mediu se scrie:

$$H_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{J}{2n} \sum_{i,j=1}^n x_i x_j - h \sum_{i=1}^n x_i \quad (5.1)$$

unde n este numărul de noduri din Λ , J/n este energia de interacție dintre spini, $h \in \mathbf{R}^d$ este cimpul magnetic constant și $x_i x_j$ este produsul scalar dintre $x_i, x_j \in R^d$.

Funcția de partiție corespunzătoare hamiltonianului $H_n(x_1, x_2, \dots, x_n)$ la temperatura $T = 1/k\beta$ va avea expresia :

$$Z_n(\beta, h) = \int e^{-\beta H_n(x_1, \dots, x_n)} \prod_{i=1}^n \rho^n(dx_i) \quad (5.2)$$

unde ρ este distribuția de probabilitate apriori pentru un spin în absența interacției. Ca urmare densitatea de energie liberă în limita termodinamică este dată de:

$$f(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \lim_{n \rightarrow \infty} \ln Z_n(\beta, h) \quad (5.3)$$

Metoda pe care o folosim pentru a evalua densitatea de energie liberă $f(\beta, h)$, este o generalizare a metodei dezvoltate în [22] în cazul particular

al unui sistem Ising unidimensional cu o interacție feromagnetică neomogenă (cu distribuția apriori $\rho(x) = (\delta(x-1) + \delta(x+1))/2$) și hamiltonianul definit inductiv prin:

$$H_1 = -x_1^2 - x_1 h, \quad H_n = H_{n-1} - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) x_n - h x_n, \quad n = 2, 3, \dots \quad (5.4)$$

Principala idee in [22] este să se demonstreze că funcțiile g_n definite prin:

$$e^{ng_n(\frac{k}{n})} = \sum_{x_1 + \dots + x_n = k} e^{-\beta H_n(x_1, \dots, x_n)} \quad k \in Z \quad (5.5)$$

au, pentru $n \rightarrow \infty$, limita $g(x)$ și $g'(x)$ este soluția unei anumite ecuații diferențiale. Cum $g(x)$ este direct legată de energia liberă a sistemului, a rezolva această ecuație diferențială înseamnă a rezolva problema. Caracterul inductiv al definiției hamiltonianului joacă rolul esențial în obținerea ecuațiilor diferențiale.

Vom considera hamiltonieni definiți printr-o relație inductivă care generalizează (5.4). Astfel:

$$H_1 = -\Psi_1(0, x_1), \quad H_n = H_{n-1} - \Psi_n\left(\frac{x_1 + \dots + x_{n-1}}{n-1}, x_n\right) \quad n = 2, 3, \dots \quad (5.6)$$

unde $x_i \in R^d$ este spinul din nodul i al rețelei, iar Ψ_n sînt funcții continue care converg, pentru $n \rightarrow \infty$, la o funcție continuă Ψ .

Hamiltonienii de acest tip sînt similari cu cei ce descriu “sistemele ierarhice”, introduse pentru prima oară de Dyson [23] pentru modelul Ising unidimensional. Ulterior “modelele ierarhice” au fost adesea folosite în studierea mecanismelor tranzițiilor de fază; pentru mai multă informație vezi [24].

În următoarea secțiune introducem funcțiile g_n pentru hamiltonienii definiți recursiv de ecuațiile (5.6) și schițăm modul de obținere a ecuației diferențiale pentru g . În ultima secțiune obținem soluția pentru modelul de cîmp mediu definit de hamiltonianul de cîmp mediu (5.1) care satisface relația inductivă (5.6) cu $\Psi(x, y) = -\frac{1}{2}x^2 + xy + hx$, h fiind cîmpul magnetic extern.

5.2 Ecuația pentru g

Fie dx volumul elementar în R^d ; fie Δx paralelipipedul de laturi Δx_α , $\alpha = 1, 2, \dots, d$ și $|\Delta x| = \Delta x_1 \Delta x_2 \dots \Delta x_d$ volumul său. Atunci, prin analogie cu

ecuația (5.5), definim g_n prin:

$$e^{ng_n(\frac{x}{n})} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta x} \int_{x_1 + \dots + x_n \in x + \Delta x} e^{-\beta H_n(x_1, \dots, x_n)} \prod_{i=1}^n \rho(dx_i) \quad (5.7)$$

Trebuie să observăm că această relație este falsă dacă distribuția de probabilitate a priori ρ nu este absolut continuă relativ la măsura Lebesgue în R^d .

Presupunem, pentru moment, ca definiția (5.7) este corectă. Mai tirziu vom arăta modul in care tratăm cazul general. Luind in considerare relația de recurență (5.6), integrala din membrul drept al ecuației (5.7) se scrie succesiv:

$$\begin{aligned} & \int_{x_1 + \dots + x_n \in x + \Delta x} e^{-\beta H_n} \prod_{i=1}^n \rho(dx_i) = \\ &= \int \rho(dx_n) \int_{x_1 + \dots + x_{n-1} \in x - x_n + \Delta x} e^{-\beta H_{n-1} + \beta \Psi(\frac{x_1 + \dots + x_{n-1}}{n-1}, x_n)} \prod_{i=1}^{n-1} \rho(dx_i) = \\ &= \int \rho(dx_n) e^{\beta \Psi_n(\frac{x-x_n}{n-1}, x_n)} \int_{x_1 + \dots + x_{n-1} \in x - x_n + \Delta x} e^{-\beta H_{n-1}} \prod_{i=1}^{n-1} \rho(dx_i) + o(|\Delta x|). \end{aligned}$$

Pentru $\Delta x \rightarrow 0$, obținem următoarea relație inductivă:

$$e^{ng_n(\frac{x}{n})} = \int \rho(dx_n) e^{\beta \Psi_n(\frac{x-x_n}{n-1}, x_n) + (n-1)g_{n-1}(\frac{x-x_n}{n-1})},$$

relație pe care o scriem echivalent în forma:

$$e^{g_n(x)} = \int \rho(dt) e^{\beta \Psi_n(\frac{nx-t}{n-1}, t) + (n-1)[g_{n-1}(\frac{nx-t}{n-1}) - g_n(x)]} \quad (5.8)$$

Presupunind acum că funcțiile g_n și derivatele lor g'_n converg uniform cind $n \rightarrow \infty$, la funcția diferentiabilă g , respectiv la g' , putem folosi următoarea evaluare:

$$g_{n-1}(\frac{nx-t}{n-1}) - g_n(x) = g(\frac{nx-t}{n-1}) - g(x) + o(1/n) = g'(x) \frac{x-t}{n-1} + o(1/n).$$

Asadar, pentru $n \rightarrow \infty$, din (5.8) obținem următoarea ecuație diferențială pentru g :

$$e^{g(x) - xg'(x)} = \int \rho(dt) e^{\beta \Psi(x, t) - g'(x)t} \quad (5.9)$$

Evident, pentru $d > 1$, g' este gradientul lui g și $xg'(x)$ este produsul scalar în R^d .

Trebuie subliniat că această metodă este permisă numai în cazul hamiltonienilor ce satisfac o recurență de forma (5.6), recurență care în pasul n induce o variație de ordin $O(1/n)$. Această clasă este totuși mai largă ca cea a hamiltonienilor de câmp mediu standard care în esență au forma (5.1) și satisfac relația de recurență (5.6) pentru un șir Ψ_n , Ψ particular, vezi relațiile (5.11) (5.12). În cazul modelului ierarhic, în locul recurenței (5.6), ipoteza de inducție exprimă pe H_{2n} în funcție de H_n și asimptotica $n \rightarrow \infty$ conduce la o ecuație neliniară integrală [24].

Pentru a aborda cazul general cind ρ nu este măsură absolut continuă în raport cu măsura Lebesgue, se consideră sirul de măsuri:

$$\mu_n(A) = \int_{(x_1+\dots+x_n)/n \in A} e^{-\beta H_n(x_1, \dots, x_n)} \prod_{i=1}^n \rho(dx_i), \quad A \subset R^d.$$

În acest fel pentru cazul cînd ρ este absolut continuă, ecuația (5.7) poate fi scrisă:

$$\mu_n(dx) = e^{ng_n(x)} dx .$$

Pentru a rezolva problema renunțăm la această egalitate, înlocuind-o cu condiția mai slabă ca ambele măsuri $\mu_n(dx)$ și $\exp(ng_n(x))dx$ să aibă aceeași comportare asimptotică pentru $n \rightarrow \infty$. Acesta este echivalent cu faptul că $\bar{\mu}_n(nt)$ și $\exp(n\tilde{g}_n(t))$ au aceeași comportare asimptotică pentru $n \rightarrow \infty$. Aici $\bar{\mu}$ este transformata Laplace a lui μ_n și \tilde{g}_n este, pînă la un semn transformata Legendre a lui g_n :

$$\bar{\mu}_n(t) = \int e^{tx} \mu_n(dx), \quad \tilde{g}_n(t) = \max_x (tx + g_n(x)) .$$

Avem acum de determinat comportarea asimptotică a lui $\bar{\mu}_n(nt)$ pentru $n \rightarrow \infty$. Definind \tilde{g}_n prin ecuația:

$$\bar{\mu}_n(nt) = \exp(n\tilde{g}_n(t))$$

și folosind relația inductivă (5.6) găsim ca mai sus o relație inductivă între \tilde{g}_n și \tilde{g}_{n-1} care duce, în limita $n \rightarrow \infty$, la o ecuație diferențială pentru $\tilde{g} = \lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{g}_n$. Printr-o transformare Legendre aceasta ecuație duce la ecuația diferențială (5.9).

Pentru a evalua densitatea de energie liberă este suficient să observăm că funcția de partiție poate fi scrisă în forma:

$$Z_n = n \int e^{ng_n(x)} dx$$

și, în ipoteza pe care am făcut-o despre convergența lui g_n , rezultă că:

$$f(\beta, h) = \beta^{-1} \max_x g(x) \quad (5.10)$$

Asadar, proprietățile termodinamice sînt complet determinate prin rezolvarea ecuației diferențiale (95.9). Această sarcină poate fi laborioasă și aceasta este cazul modelului Ising unidimensional care a fost studiat în [22]. În [25], au fost considerați hamiltonieni care corespund, în metoda noastră, la:

ρ = distribuție uniformă pe cercul unitate pentru $d = 2$
 ρ = distribuție uniformă pe sfera unitate pentru $d = 3$ și

$$\Psi_n(x, y) = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) (ax_1y_1 + b \sum_{\alpha=2}^d x_\alpha y_\alpha) \quad a > 0, b \geq 0, x, y \in R^d$$

și s-au folosit simulări numerice pentru determinarea diverselor mărimi fizice. Aceste sisteme pot fi abordate, pentru obținerea de rezultate calitative, prin metoda descrisă, i.e. prin rezolvarea numerică a ecuației diferențiale (5.9), aceasta fiind o sarcină mult mai ușoară decît simularea numerică.

5.3 Soluția în cazul invariant la rotații

Hamiltonianul de cîmp mediu (5.1), with $j = 1$, satisface relația inductivă (5.6) cu

$$\Psi_n(x, y) = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) x^2 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) xy^2 + \frac{1}{2n} y^2 + hy \quad (5.11)$$

și

$$\Psi(x, y) = -\frac{1}{2} x^2 + xy + hy . \quad (5.12)$$

Presupunem că distribuția de probabilitate ρ este pară ($\rho(A) = \rho(-A)$) pentru orice mulțime boreliană $A \subset R^d$) și $\exp(\epsilon + 4)t$ este ρ integrabilă pentru $\epsilon > 0$. Fie

$$F(x) = \ln \int e^{xt} \rho(dt), \quad x \in R^d \quad (5.13)$$

Este usor de văzut că F este o funcție C^∞ . $F(x) = F(-x)$ și F crește cel mult ca $|x|^{4/3}$ pentru $|x| \rightarrow \infty$.

Remarcăm că $F(x)$ este pînă la un factor energia liberă a unui spin in cimpul magnetic h .

Considerăm mai intii cazul $d = 1$ și luam cimpul magnetic $h \geq 0$. Ne mărginim la distribuțiile ρ care satisfac condiția Ellis și Newman [26] astfel incit magnetizarea determinată de F satisface inegalitatea GHS (vezi remarca anterioară). In aceste condiții, funcția $F : R \rightarrow R$ are următoarele proprietăți:

$$\begin{aligned} (i) \quad F'(x) &> 0 \quad \text{pentru} \quad x > 0 \\ (ii) \quad F''(x) &> 0 \quad \text{pentru} \quad x \in R, \quad F''(\infty) = 0 \\ (iii) \quad F'''(x) &< 0 \quad \text{pentru} \quad x > 0 \end{aligned} \tag{5.14}$$

Inegalitațiile (i) și (ii) nu sint nimic altceva decit primele două inegalități Griffith și (iii) este inegalitatea GHS [27],[28]. Avind in vedere definiția (5.13), ecuația diferențială (5.9) devine:

$$g(x) - xg'(x) + \frac{1}{2}\beta x^2 = F(\beta(x+h) - g'(x)) \tag{5.15}$$

Punind $\varphi(x) = \beta(x+h) - g'(x)$ această ecuație devine:

$$F'(\varphi) = x$$

și pentru că F' este inversabilă (cf. (ii)) ecuația (5.15) poate fi scrisă:

$$g'(x) = \beta(x+h) - F'^{-1}(x) \tag{5.16}$$

Prin integrare directă obținem g :

$$g(x) = \frac{1}{2}\beta x^2 + \beta hx - xF'^{-1}(x) + F(F'^{-1}(x)) \tag{5.17}$$

Pentru a obține maximul pentru g trebuie să observăm că $g(-x) = g(x) - 2\beta hx$ (ținînd cont ca F este pară) si, pentru că $h \geq 0$, g este maxim pentru $x \geq 0$. Ne interesează soluțiile pozitive ale ecuației:

$$F'(\beta(x+h)) = x \tag{5.18}$$

F' fiind strict concavă pe semi-axa pozitivă, ecuația (5.18) are cel mult două soluții pozitive. Dacă $h > 0$, ținând cont că $F''(\infty) = 0$ și $F'(h) > 0$, ecuația (5.18) are o singură soluție pozitivă. Dacă $h = 0$ atunci $x = 0$ este o soluție pentru (5.18) și vom avea și o a doua dacă, și numai dacă, $\beta F''(0) > 0$. Fie $m(\beta, h)$ soluția cea mai mare a ecuației (5.18):

$$m(\beta, h) : \begin{cases} > 0 & \text{pentru } h > 0 \\ = 0 & \text{pentru } \beta \leq \beta_c = 1/F''(0) \\ > 0 & \text{pentru } \beta > \beta_c \end{cases} \quad (5.19)$$

Cum $g'(x) > 0$ este echivalent cu $F'(\beta(x+h)) > x$, rezultă că g este maxim în $m(\beta, h)$. Considerînd ecuația (5.18) și expresia pentru g , energia liberă poate fi scrisă:

$$f(\beta, h) = \frac{1}{2}m^2(\beta, h) - \frac{1}{\beta}F(\beta(m(\beta, h) + h)) \quad (5.20)$$

Putem vedea din (5.20) că $\partial f/\partial h = -\beta m(\beta, h)$, ca urmare, $m(\beta, h)$ reprezintă magnetizarea sistemului. Astfel $1/\beta_c$ este temperatura critică și $m(\beta, 0)$ este magnetizarea spontană cînd $\beta > \beta_c$. Energia liberă $f(\beta, h)$ și magnetizarea $m(\beta, h)$ sînt ne-analitice în $(\beta, h) = (\beta_c, 0)$. Ecuațiile (16) și (18) sînt comparabile cu cele obișnuite [29].

Considerăm cazul $d \geq 2$. Avem de rezolvat aceeași ecuație (5.15), care acum este o ecuație cu derivate parțiale pentru $g'(x) = (\partial g/\partial x_1, \dots, \partial g/\partial x_d)$. Se poate vedea ușor că, dacă aplicația $x \rightarrow F'(x) = (\partial F/\partial x_1, \dots, \partial F/\partial x_d)$, $x \in R^d$ este inversabilă și diferențiabilă, atunci funcția g , definită de (5.17), este o soluție pentru (5.15). Vom arăta că Jacobianul $\partial^2 F/\partial x_\alpha \partial x_\beta$ al aplicației F' este strict pozitiv definit și, ca urmare, F'^{-1} există și este o funcție C^∞ . Considerînd definiția lui F avem:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = \langle t_\alpha t_\beta \rangle_\mu - \langle t_\alpha \rangle_\mu \langle t_\beta \rangle_\mu \quad \alpha, \beta = 1, \dots, d \quad (5.21)$$

unde $\langle \cdot \rangle_\mu$ este media definită de măsura de probabilitate în R^d :

$$\mu(dt) = \frac{e^{xt} \rho(dt)}{\int e^{xt} \rho(dt)}.$$

Pentru orice funcție f care este integrabilă și de pătrat integrabil în raport cu μ , avem inegalitatea:

$$0 \leq \langle f(t) - f(t') \rangle_{\mu \otimes \mu} = 2(\langle f^2 \rangle_{\mu} - \langle f \rangle_{\mu}^2) \quad (5.22)$$

unde $\mu \otimes \mu$ este produsul direct de măsuri în R^{2d} . Inegalitatea (5.22) devine egalitate dacă, și numai dacă, $f(t)$ este μ -a.e. constantă. Folosind inegalitatea (5.22) pentru funcția $f(t) = (t_1 \xi_1 + \dots + t_d \xi_d)$, $\xi \in R^d$, obținem ușor că Jacobianul lui F' este strict pozitiv definit.

Astfel, ecuația (5.17) ne dă expresia explicită pentru g și în cazul $d \geq 2$. Oricum, pentru niste distribuții arbitrare ρ , energia liberă și magnetizarea nu sînt ușor de obținut. Dar, dacă ρ este invariant la rotații în R^d , atunci problema de a găsi un maxim pentru g se reduce la cazul $d = 1$. Într-adevăr, invarianța la rotații pentru ρ implica invarianța la rotații pentru F' și se deduce ușor că:

$$RF'(x) = F'(Rx) \quad x \in R^d$$

$$RF'^{-1}(x) = F'^{-1}(Rx) \quad x \in F'(R^d) \subset R^d$$

pentru orice rotație R din R^d . Cu aceste relații, din (5.17), avem:

$$g(Rx) = g(x) + \beta h(Rx - x).$$

Pentru orice $x \in R^d$ există o rotație R astfel încît $Rx = \lambda h$, cu $\lambda \geq 0$, și ca urmare:

$$g(Rx) - g(x) = \beta(|h||x| - hx) \geq 0$$

astfel încît maximul pentru g este atins pe raza $\{\lambda h, \lambda \geq 0\}$.

A Algebre C^* și stări

În această anexă colectăm o serie de rezultate privind algebrele C^* cu scopul de a face mai fluentă parcurgerea textului principal al lucrării.

O $*$ -algebră este o algebră \mathcal{A} peste corpul numerelor complexe \mathbb{C} împreună cu o involuție $A \rightarrow A^*$ astfel că pentru oricare $A, B \in \mathcal{A}$ și $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ sunt îndeplinite următoarele condiții:

$$\text{i) } A^{**} = A$$

$$\text{ii) } (\alpha A + B\beta)^* = \bar{\alpha}A^* + \bar{\beta}B^*$$

$$\text{iii) } (AB)^* = B^*A^*$$

O algebră \mathcal{A} este o *algebră normată* dacă fiecărui element $A \in \mathcal{A}$ i se asociază un număr real $|A|$, norma lui A , astfel că sunt îndeplinite condițiile:

$$\text{i}') \quad |A| \geq 0 \quad \text{și} \quad |A| = 0 \iff A = 0,$$

$$\text{ii}') \quad |\alpha A| = |\alpha| |A|,$$

$$\text{iii}') \quad |A + B| \leq |A| + |B|,$$

$$\text{iv}') \quad |AB| \leq |A| |B|.$$

O algebră normată \mathcal{A} care este spațiu metric complet în raport cu metrica determinată de normă se numește *algebră Banach*. O algebră Banach cu involuție (i.e. o algebră Banach care este și $*$ -algebră) care pentru orice $A \in \mathcal{A}$ satisface condiția:

$$\text{a) } |A| = |A^*|,$$

se numește *$*$ -algebră Banach*.

O C^* -algebră este o algebră Banach cu involuție \mathcal{A} în care pentru orice $A \in \mathcal{A}$ este satisfăcută condiția:

$$\text{b) } |A^*A| = |A|^2.$$

Condiția b) implică condiția a) astfel că o C^* -algebră este $*$ -algebră Banach.

Principalele exemple de C^* -algebre sunt:

1) $\mathcal{A} = \mathcal{B}(\mathcal{H})$, algebra operatorilor mărginiți pe un spațiu hilbert \mathcal{H} . Involuția este trecerea de la operatorul $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ la adjunctul său A^* , iar norma este norma operatorială obișnuită $|A| = \sup\{|Ax|; |x| = 1\}$.

2) $C(X)$ spațiul funcțiilor continue pe spațiul compact X . Involuția este conjugarea complexă $f \rightarrow \bar{f}$, iar norma este $|f| = \sup\{|f(x)|; x \in X\}$. Sau, mai general, $C_0(X)$ spațiul funcțiilor continue pe spațiul local compact X care se anulează la infinit, i.e. pentru orice $\varepsilon > 0$ există un compact K_ε astfel că $|f(x)| < \varepsilon$ pentru $x \notin K_\varepsilon$.

Aceste exemple sunt modele generice deoarece orice C^* -algebră comutativă este, pînă la un izomorfism, de tipul 2), iar orice C^* -algebră este izomorfă cu o subalgebră a unei algebre de tipul 1).

Propoziția 1. In orice C^* -algebră \mathcal{A} avem $|A| = \sup\{|AB|; |B| = 1, A \in \mathcal{A}\}$.

Dacă o C^* -algebră \mathcal{A} nu are unitate atunci se poate adăuga o unitate: se consideră $\mathcal{A}' = \mathcal{A} \oplus \mathbb{C}$ și se introduce produsul,

$$(A, \alpha)(B, \beta) = (AB + \beta A + \alpha B, \alpha\beta), \quad A, B \in \mathcal{A}, \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

cu involuția $(A, \alpha)^* = (A^*, \bar{\alpha})$ și norma

$$|(A, \alpha)| = \sup\{|AB + \alpha B|; |B| = 1, B \in \mathcal{A}\}.$$

Se arată că \mathcal{A}' este C^* -algebră și că $I = (0, 1)$ este unitate în \mathcal{A}' . Evident algebra \mathcal{A} se identifică cu subalgebra formată de elementele de forma $(A, 0)$ din \mathcal{A}' .

Această construcție permite, într-o anumită măsură, să ne restrîngem la cazul C^* -algebrelor cu unitate. *In cele ce urmează, dacă nu se specifică altfel, se presupune că C^* -algebrele au unitate.*

Fie \mathcal{A} o C^* -algebră cu unitate și $A \in \mathcal{A}$. Se numește *mulțime rezolventă* a lui A mulțimea $\rho(A) = \{z \in \mathbb{C}; (A - z)^{-1} \text{ există}\}$, iar aplicația

$$z \rightarrow (A - z)^{-1} \quad z \in \rho(A)$$

se numește *rezolventa* lui A . Complementara mulțimei rezolvente: $\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ se numește *spectrul* lui A . Deoarece pentru $|z| > |A|$ seria

$$-\frac{1}{z} \sum_{n \geq 0} \left(\frac{A}{z}\right)^n$$

este convergentă în \mathcal{A} și suma sa este $(A - z)^{-1}$ rezultă că mulțimea rezolventă a lui A nu este vidă și că spectrul $\sigma(A) \subset \{z; |z| \leq |A|\}$. Se vede cu ușurință că $\rho(A)$ este deschisă, astfel că $\sigma(A)$ este închisă și compactă. Mai mult rezolventa $(A - z)^{-1}$ este analitică pe $\rho(A)$.

Raza spectrală a lui A se definește prin $r(A) = \sup\{|z|; z \in \sigma(A)\}$ Evident $\rho(A) \leq |A|$.

Propoziția 2. Intr-o C^* -algebră raza spectrală a unui element A are expresia

$$r(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} |A^n|^{1/n} = \inf_n |A^n|^{1/n}.$$

Un element A al unei algebre C^* se numește:

normal dacă $AA^* = A^*A$,

autoadjunct dacă $A = A^*$,

izometric dacă $A^*A = I$,

unitar dacă $AA^* = A^*A = I$,

pozitiv dacă este autadjunct și $\sigma(A) \subset [0, \infty)$.

Propoziția 3. Intr-o algebră C^* \mathcal{A} au loc:

- a) Dacă A este normal atunci $r(A) = |A|$.
- b) Dacă A este autoadjunct atunci $\sigma(A) \subset [-|A|, |A|]$.
- c) Dacă este izometric atunci $r(A) = 1$.
- d) Dacă este unitar atunci $\sigma(A) \subset \{z \in \mathbb{C}; |z| = 1\}$
- e) Pentru orice A din \mathcal{A} avem $\sigma(A^*) \subset \overline{\sigma(A)}$ și $\sigma(A^{-1}) = \sigma(A)^{-1}$.
- f) Pentru orice polinom P avem $\sigma(P(A)) = P(\sigma(A))$
- g) Pentru orice A, B din \mathcal{A} avem $\sigma(AB) \cup \{0\} = \sigma(BA) \cup \{0\}$.

Din punctul a) rezultă o proprietate importantă a algebrelor C^* . Deoarece pentru orice $A \in \mathcal{A}$, AA^* este normal, conform cu a) avem $|AA^*| = r(AA^*)$. Cum prin definiția C^* -algebrei $|AA^*| = |A|^2$, rezultă că norma lui A este determinată de spectrul lui AA^* , spectru care depinde numai de structura algebrică a lui \mathcal{A} . Avem deci:

Propoziția 4. Dacă $*$ -algebra \mathcal{A} este C^* -algebră față de normele $|\cdot|_1$ și $|\cdot|_2$, atunci $|\cdot|_1 = |\cdot|_2$.

Fie \mathcal{A}, \mathcal{B} două $*$ -algebre, numim $*$ -morfism (sau simplu morfism) al $*$ -algebrei \mathcal{A} în $*$ -algebra \mathcal{B} , o aplicație $\pi : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}$ care, pentru $A, B \in \mathcal{A}$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, satisface:

- i) $\pi(\alpha A + \beta B) = \alpha\pi(A) + \beta\pi(B)$,
- ii) $\pi(AB) = \pi(A)\pi(B)$,
- iii) $\pi(A^*) = \pi(A)^*$.

Deoarece o algebră C^* este $*$ -algebră, definiția acoperă cazurile cînd una sau ambele algebre sunt C^* -algebre. Trebuie reținut că în definiția $*$ -morfismului intervin numai proprietăți algebrice, nu și proprietăți metrice, în concordanță cu propoziția anterioară.

Propoziția 5. Fie \mathcal{A}, \mathcal{B} două C^* -algebre și $\pi : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}$ un $*$ -morfism. Atunci avem:

- i) π păstrează pozitivitatea, i.e. $A \geq 0$ implică $\pi(A) \geq 0$;
- ii) π este continuu și $|\pi(A)| \leq |A|$ pentru $A \in \mathcal{A}$;
- iii) $\pi(\mathcal{A})$ este închisă în \mathcal{B} i.e. $\pi(\mathcal{A})$ este C^* -algebră.

Propoziția 6. (Calcul funcțional) Fie \mathcal{A} o algebră C^* și $A \in \mathcal{A}$ un element autoadjunct. Fie $C(\sigma(A))$, C^* -algebra funcțiilor continue pe $\sigma(A)$ și \mathcal{A}_A , C^* -algebra generată de A (i.e. cea mai mică C^* -algebră care conține pe A). Există un unic $*$ -izomorfism:

$$\begin{array}{ccc} C(\sigma(A)) & \longrightarrow & \mathcal{A}_A \\ f & \longmapsto & f(A) \end{array}$$

care duce funcția $\mathbf{1}$ (i.e. $\mathbf{1}(x) = 1, x \in \sigma(A)$) în $I \in \mathcal{A}_A$ și $\text{id}_{\sigma(A)}$ în A . Mai mult avem $\sigma(f(A)) = f(\sigma(A))$ pentru orice $f \in C(\sigma(A))$.

O *reprezentare* a unei C^* -algebre \mathcal{A} este o pereche (\mathcal{H}, π) în care \mathcal{H} este un spațiu hilbert, iar π este un $*$ -morfism din \mathcal{A} în $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Reprezentarea se zice *fidelă* dacă π este injectivă i.e. $\ker \pi = \{0\}$.

Propoziția 7. Fie (\mathcal{H}, π) o reprezentare a C^* -algebrei \mathcal{A} . Următoarele condiții sunt echivalente:

- i) π este fidelă,
- ii) $|\pi(A)| = |A|$ pentru orice $A \in \mathcal{A}$,
- iii) $\pi(A) > 0$ pentru $A > 0$.

O formă liniară ω pe C^* -algebra \mathcal{A} se zice *pozitivă* dacă

$$\omega(A) \geq 0, \text{ pentru } A \geq 0, A \in \mathcal{A}$$

sau echivalent

$$\omega(A^*A) \geq 0, \text{ pentru orice } A \in \mathcal{A}.$$

Este imediat că o formă pozitivă satisface inegalitatea Cauchy-Schwarz:

$$|\omega(B^*A)|^2 \leq \omega(B^*B)\omega(A^*A).$$

Propoziția 8. Fie ω o formă liniară pe o C^* -algebră (cu unitate), atunci următoarele afirmații sunt echivalente:

- i) ω este pozitivă;
- ii) ω este continuă cu $|\omega| = \omega(I)$.

Se numește *stare* orice formă liniară pozitivă. Teorema Hahn-Banach ne asigură că există suficiente stări nenule.

Propoziția 9. Fie A un element oarecare din C^* -algebra \mathcal{A} . Există o stare ω pe \mathcal{A} astfel că $\omega(A^*A) = |A|^2$.

Să observăm că orice reprezentare (\mathcal{H}, π) a C^* -algebrei \mathcal{A} determină un tip de stări: pentru orice vector Ω de normă 1 din \mathcal{H} aplicația

$$\omega(A) = \langle \Omega, \pi(A)\Omega \rangle \quad A \in \mathcal{A}$$

este o stare. Teorema G.N.S. (Ghelfand, Naimark, Segal) arată că orice stare este de acest tip.

Propoziția 10. (G.N.S.) Fie \mathcal{A} o C^* -algebră (cu unitate) și ω o stare pe \mathcal{A} . Există un spațiu hilbert \mathcal{H}_ω , o reprezentare $\pi_\omega : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H}_\omega)$ și un vector Ω_ω de normă 1 din \mathcal{H}_ω astfel că:

$$\omega(A) = \langle \Omega_\omega, \pi_\omega(A)\Omega_\omega \rangle$$

și $\{\pi_\omega(A)\Omega_\omega; A \in \mathcal{A}\}$ este densă în \mathcal{H}_ω . În aceste condiții reprezentarea este unică pînă la un izomorfism unitar.

References

- [1] G. Gallavotti and E.G.D. Cohen. Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics. *Phys. Rev. Letters*, 74:2694–2697, 1995.
- [2] D. Ruelle. General linear response formula in statistical mechanics, and fluctuation-dissipation theorem far from equilibrium. *Phys. Lett. A*, 245:220–224, 1998.
- [3] C. P. Dettmann and G. P. Morriss. Proof of lyapunov exponent pairing for systems at constant kinetic energy. *Phys. Rev. E*, 53:R5541–5544, 1996.
- [4] Ruelle. Smoth dynamics and new theoretical ideas in nonequilibrium statistical mechanics. *J. Stitist. Phys.*, 95:393–468, 1999.
- [5] L. R. Bellet. Open classical systems. In *Open Quantum Systems II*. Springer, 2006.
- [6] O. Bratteli and D. W. Robinson. *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics*, volume 1. Springer, 1979.
- [7] O. Bratteli and D. W. Robinson. *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics*, volume 2. Springer, 1981.
- [8] J. Fröhlich, M. Merkli, and D. Ueltschi. Dissipative transport: thermal contacts and tunneling junctions. *Ann. Henri Poincare*, 4:897–945, 2004.
- [9] W. Aschbabacher, V. Jakšić, Y. Pautrat, and C.-A. Pillet. Transport properties of quasi-free fermions. 2006.
- [10] W. Aschbabacher, V. Jakšić, Y. Pautrat, and C.-A. Pillet. Topics in non-equilibrium quantum statistical mechanics. In *Open Quantum Systems III*. Springer, 2006.
- [11] M. Merkli. Stability of equilibria with a condensate. *Comm. Math. Phys.*, 257:621–640, 2005.
- [12] N. Angelescu and M. Bundaru. On the transport between condensed phases. *J. Phys. A:Math. Theor.*, 40:5565–5573, 2007.

- [13] M. Merkli, M. Mück, and I. M. Sigal. Theory of non-equilibrium stationary states as theory of resonances. 2006.
- [14] N. Anghel, M. Bundaru, and R. Bundaru. Quasi-free quantum statistical models for tunneling junction. In Grunfeld C. P., Ion S., and Marinocchi G., editors, *Topics in Applied Mathematics and Mathematical Physics*. Editura Academiei Române, 2007.
- [15] S. R. Bundaru. Local expectations in quantum tunnelling. *Rom. Rep. Phys.*, 60, 2008.
- [16] H. D. Cornean, A. Jensen, and V. Moldoveanu. A rigorous proof for the Landauer-Büttiker formula. *J.Math.Phys.*, 46:042106, 2005.
- [17] P. Poulin. Green's functions of generalized laplacians. In *CRM Proceedings and Lecture Notes*, volume 42, pages 417–452, 2007.
- [18] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer-Verlag, 1976.
- [19] D. R. Yafaev. *Mathematical scattering theory*. Amer. Math. Soc., Providence, Rhode Island, 1992.
- [20] S. R. Bundaru. Interference in quantum tunnelling. 2008. (în curs de finalizare).
- [21] S. R. Bundaru. New method for latticeal mean field models. *Mod. Phys. Lett. B*, 11(8):339–345, 1997.
- [22] O. Costin, R. D. Costin, and C. P. Grunfeld. *J. Stat. Phys.*, 59:1531, 1990.
- [23] F. J. Dyson. *Commun. Math. Phys.*, 12:91, 1969.
- [24] Ya. G. Sinai. *Theory of Phase Transitions; Rigorous Results*. Pergamon Press, Oxford, 1982.
- [25] S. Romano. *Mod. Phys. Lett.*, B9:1447, 1995.
- [26] R. S. Ellis and Ch. M. Newman. *Trans. Am. Math. Soc.*, 237:83, 1978.
- [27] J. Ginibre. General formulation of Griffiths' inequalities. *Commun. Math. Phys.*, 16:310–328, 1970.

- [28] J. Bricmont. Correlation inequalities and classical spin systems. In *Proceedings of the Brasov International School*, 1979.
- [29] C. J. Thomson. *Mathematical Statistical Mechanics*. Princeton University Press, 1979.

Contents

1	INTRODUCERE	1
2	ABORDAREA ALGEBRICĂ	6
2.1	Punerea problemei	6
2.2	Spații Fock	8
2.3	Spații fock bosonice și fermionice	10
2.4	Algebra relațiilor de anticomutare	13
2.5	Stări cvasilibere pe algebra CAR	15
3	HAMILTONIANUL UNIPARTICULA	18
3.1	Descrierea modelului	18
3.2	Proprietățile spectrale ale sistemului necuplat	19
3.3	Proprietățile spectrale ale sistemului cuplat	24
4	CONSTRUCTIA NESS	31
4.1	Exprimarea NESS prin operatorii Möller	31
4.2	Exprimarea mediilor	34
4.3	Exemple	38
4.3.1	Corelațiile pentru rezervoare	38
4.3.2	Cuplaj între rezervoare unidimensionale	41
5	Spini clasici în aproximația câmpului mediu	49
5.1	Descrierea modelului	49
5.2	Ecuția pentru g	50
5.3	Soluția în cazul invariant la rotații	53
A	Algebre C^* și stări	57